

АКАДЕМИЯ НАУК СССР · СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ  
ИНСТИТУТ КАТАЛИЗА

М. Г. СЛИНЬКО, В. С. БЕСКОВ, В. Б. СКОМОРОХОВ,  
В. А. КУЗИН, В. М. ЦЫГАНОВ, А. В. ЗАСМОЛИН

# Методы моделирования каталитических процессов на аналоговых и цифровых вычислительных машинах

Ответственный редактор  
кандидат химических наук  
А. Ермакова

ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА» · СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ  
НОВОСИБИРСК · 1972

# ОГЛАВЛЕНИЕ

## Введение

### Глава I. Математическое описание каталитических процессов

- § 1. Каталитический реактор
- § 2. Неподвижный слой катализатора
  - Составляющие процесса
  - Общий вид математического описания каталитических процессов
- § 3. Процесс на зерне катализатора
- § 4. Квазигомогенная модель неподвижного слоя катализатора
- § 5. Частные случаи неподвижного слоя катализатора
  - Радиальный перенос в круглой трубке
  - Поперечный перенос в межтрубном пространстве
  - Продольное смешение
  - Идеальное вытеснение
  - Автотермический слой идеального вытеснения с внутренним теплообменом
- § 6. Псевдооживленный слой катализатора
  - Слой идеального смешения
  - Двухфазная модель
- § 7. Основные виды уравнений математического описания

### Литература к главе I

### Глава II. Методы моделирования на аналоговых вычислительных машинах

- § 1. Аналоговые и цифровые вычислительные машины
- § 2. Виды уравнений, решаемых на АВМ
  - Слой идеального вытеснения
  - Поперечный перенос вещества и тепла. Неполное смешение
- § 3. Решение уравнений с начальными условиями (слой идеального вытеснения и кинетические модели)
  - Принципы масштабирования (подготовка задачи к решению)
  - Пример масштабирования и решение уравнений, описывающих НАК-процесс
  - Масштабирование задачи
  - Машинные уравнения и блок-схема задачи
  - Полимеризация этилена на окисном катализаторе
  - Окисление метанола в формальдегид на окисных катализаторах
  - Окисление этилена в окись этилена
  - Парафазное гидрохлорирование ацетилен
- § 4. Решение уравнений с краевыми условиями
  - Псевдооживленный слой катализатора и изотермический процесс с продольным смешением
  - Процесс внутри зерна катализатора
  - Неизотермический процесс с продольным смешением
  - Нестационарные процессы в псевдооживленном слое катализатора
  - Реакторы с внутренним теплообменом. Термический крекинг
  - Синтез высших спиртов

### Литература к главе II

### Глава III. Численные методы расчета на цифровых вычислительных машинах

- § 1. Классификация уравнений математического описания
- § 2. Описание и анализ алгоритмов численного интегрирования
  - Сеточный или конечно-разностный метод
  - Выбор сетки, аппроксимация, алгоритмы счета

Устойчивость . . . . .	80
Сходимость . . . . .	81
Вспомогательные утверждения . . . . .	82
§ 3. Численное интегрирование параболических уравнений . . . . .	85
Процессы внутри зерна катализатора . . . . .	85
Явная схема . . . . .	86
Неявная схема . . . . .	87
Некоторые свойства предлагаемых схем . . . . .	89
О выборе шага по времени . . . . .	91
Задача продольного смещения . . . . .	92
Явная схема . . . . .	93
Неявная схема . . . . .	94
Радиальный перенос в круглой трубке . . . . .	96
Явная схема . . . . .	97
Неявная схема . . . . .	98
Поперечный перенос в межтрубном пространстве . . . . .	99
Общая задача в круглой трубке с постоянными коэффициентами . . . . .	103
Метод дробных шагов . . . . .	104
Метод Писмана-Рэкфорда . . . . .	107
Общая задача в межтрубном пространстве с постоянными коэффициентами . . . . .	109
Общая задача в круглой трубке с переменными коэффициентами . . . . .	111
§ 4. Численное интегрирование гиперболических уравнений и смешанных задач . . . . .	115
Процессы в слое идеального вытеснения . . . . .	115
Двухфазная модель псевдооживленного слоя . . . . .	120
Литература к главе III . . . . .	122
IV. Приложения . . . . .	123
§ 1. Общие замечания к программам № 1—7 . . . . .	124
§ 2. Процесс внутри зерна катализатора . . . . .	126
§ 3. Радиальный перенос в круглой трубке . . . . .	128
§ 4. Продольный перенос . . . . .	130
§ 5. Аппарат с внутренним теплообменом с простыми противоточными трубками . . . . .	132
§ 6. Двухфазная модель псевдооживленного слоя . . . . .	133
§ 7. Общий случай (метод Писмана-Рэкфорда) . . . . .	135
§ 8. Общий случай (метод дробных шагов) . . . . .	139
§ 9. Поперечный перенос в межтрубном пространстве . . . . .	142
§ 10. Общий случай с переменными коэффициентами . . . . .	144

---

## ВВЕДЕНИЕ

За последние десять лет инженеры-химики стали уделять большое внимание вопросам научного проектирования и расчета химических реакторов, в которых протекают химические реакции.

Методы физического моделирования химических реакторов — перенос результатов испытаний на небольших установках прямо на промышленные реакторы, используя теорию подобия, — не привели к положительным результатам. Только в очень немногих случаях удалось достаточно полно предсказать поведение промышленного реактора на основе лабораторных испытаний. Причина этого заключается не в неудачном применении теории подобия.

В химическом реакторе протекает сложный технологический процесс. Составляющими процесса являются: химическое превращение, перенос реагирующих веществ и продуктов реакции, передача тепла, движение потоков газа или жидкости. Характер взаимодействия между составляющими и их удельный вес в суммарном процессе зависит от масштаба реактора, поэтому перенос результатов измерений на реакторе одного масштаба на работу реактора другого масштаба может привести к значительным ошибкам.

Для определения поведения реактора любого масштаба целесообразно использовать метод математического моделирования [1—4]. Основой этого метода является расчленение процесса на независимые от масштаба составляющие и изучение закономерностей протекания всех составляющих с целью выражения результатов исследований в математической форме. Полученные данные по всем составляющим объединяются в математическом описании суммарного процесса, протекающего в реакторе. Вид математического описания должен быть инвариантен к масштабу реактора, а размеры реактора входят в начальные и граничные условия уравнений математического описания. Дальнейший анализ работы реактора проводится с помощью полученной математической модели — математического описания.

Попытки использовать некоторые идеи математического моделирования для анализа и расчета химических процессов и реакторов предпринимались более тридцати лет назад. Однако они наталкивались на трудность анализа получаемых при этом уравнений математического описания. Химический процесс — сложное явление, и анализ его математического описания до настоящего времени в общем случае провести не удается. Иногда, значительно упрощая полученные уравнения, удавалось это сделать, но, как правило, упрощения сильно ограничивали

область использования результатов анализа. С развитием вычислительной математики и техники были сняты ограничения на сложность уравнений математического описания, и стало возможным проводить анализ более строго, а расчеты — для самых различных химических процессов. Это дало толчок бурному развитию метода математического моделирования химических процессов.

Одновременно выдвинулись новые задачи и проблемы математического моделирования, в частности использование методов вычислительной математики и численного анализа для решения уравнений математического описания химических процессов с помощью современных вычислительных машин. Здесь надо выделить два основных направления в использовании вычислительной математики и техники: моделирование на цифровых вычислительных машинах (ЦВМ) и моделирование на аналоговых вычислительных машинах (АВМ). Первое направление требует знаний методов численного решения уравнений математического описания и методов оптимизации химических процессов и реакторов. Хотя оптимизация и требует использования методов численного решения уравнений, но является самостоятельной областью численного анализа. Специфика второго направления (моделирование на АВМ) состоит в том, что аналоговая вычислительная машина представляет собой (в рабочем состоянии) электронную схему, работа которой описывается такими же уравнениями, как и работа исследуемого процесса. Поэтому, изучая процесс химический на модели другой, физической, природы (электронная схема), надо учитывать особенности работы последней.

В предлагаемой вниманию читателей книге рассмотрены методы моделирования и расчета каталитических процессов, причем основное внимание уделено, с одной стороны, методам численного решения уравнений математического описания каталитических процессов на цифровых вычислительных машинах и, с другой стороны, методам их решения на аналоговых вычислительных машинах и анализу некоторых особенностей, возникающих при моделировании каталитических процессов. Приведены типовые программы для ЦВМ и блок-схемы основных задач для их решения на АВМ. В книге отражены исследования коллектива сотрудников отдела моделирования каталитических процессов Института катализа СО АН СССР и лаборатории химических задач Вычислительного центра СО АН СССР.

---

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

### § 1. КАТАЛИТИЧЕСКИЙ РЕАКТОР

Для химической технологии теоретической основой и методом решения проблем, связанных с разработкой химического процесса, созданием аппаратуры, определением оптимальных условий и т. д., является моделирование процессов. Моделирование — изучение процессов на моделях с целью предсказания результатов их протекания в аппаратах заданной конструкции и любого масштаба. Моделирование связано с решением четырех крупных проблем — анализ системы с целью выделения составляющих частей процесса, не зависящих от масштаба; изучение их; синтез полученных закономерностей в виде математического описания или знаковой модели; анализ полученной модели с целью предсказания характера протекания процесса в аппарате любого масштаба.

Для одного и того же реактора может быть выбрано несколько различных моделей, в зависимости от того, какие свойства реактора необходимо исследовать. Например, если целью исследования являются анализ, оптимизация и расчет реактора, надо использовать одну модель. Если целью исследования является изучение механизма составляющих процессов, протекающих в реакторе, модель может быть уже другая, хотя в обоих случаях объект исследования — реактор — один и тот же. Ниже везде принято, что модели реактора и протекающих в нем процессов выбраны с целью исследования работы и расчета всего реактора. При этом предполагается, что отдельные составляющие процесса: скорости химических реакций, коэффициенты тепло- и массопереноса и т. д. — изучены и известны их характеристики. Несмотря на сложность процессов, протекающих в реакционных устройствах, для их понимания необходимо исследование идеальных моделей. Зачастую оказывается, что реальные процессы довольно хорошо описываются такими идеальными моделями. В более сложных случаях в реакционной зоне можно выделить отдельные участки, которые хорошо описываются идеальными моделями, и, таким образом, с их помощью можно описать практически самые различные процессы.

Прежде чем перейти к определению всех характеристик процесса, необходимых для его моделирования, рассмотрим коротко, что представляет собой химико-технологический процесс, протекающий в реакторе.

Поскольку в результате протекания химической реакции выделяется или поглощается тепло, появляются одни вещества и исчезают другие, то реактор, как правило, кроме катализатора, содержит элементы или устройства, в которых осуществляется теплообмен, добавление (или

удаление) определенных компонентов реакционной смеси, устройство распределения потоков в аппарате и т. д. Этими устройствами являются теплообменники, теплообменные поверхности в реакционной зоне, смесители, распределители и т. д. Основное в реакторе — реакционная зона, где находится катализатор и где протекает собственно химическое превращение. Остальные устройства вспомогательные. С их помощью обеспечивается и поддерживается необходимый технологический режим в реакционной зоне.

Следовательно, из основных конструктивных элементов реактора можно выделить две основные группы, различающиеся по своим технологическим назначениям: а) реакционные устройства, где собственно протекают химические реакции; б) вспомогательные устройства, где протекают только физические процессы переноса тепла и вещества.

Основную трудность для моделирования и расчета реакторов представляет первая группа элементов — реакционные устройства, где протекают одновременно и химические реакции и физические процессы переноса.

Реакционное устройство (в некоторых случаях называемое катализаторной коробкой) состоит из реакционной зоны (слоя катализатора) и непосредственно примыкающих к ней поверхностей теплообмена. Ниже будут даны методики моделирования и расчета именно реакционных устройств реактора. О моделировании и расчетах вспомогательных устройств — теплообменников, смесителей, распределителей — имеется специальная литература, и здесь этих вопросов касаться не будем.

## § 2. НЕПОДВИЖНЫЙ СЛОЙ КАТАЛИЗАТОРА

### Составляющие процесса

Слой катализатора представляет собой сложную гетерогенную систему, в которой взаимодействуют неподвижные, беспорядочно уложенные (в неподвижном слое катализатора) или хаотически витающие (в псевдооживленном слое) частицы катализатора с текущим через них потоком газа или жидкости (рис. 1.1). Хи-

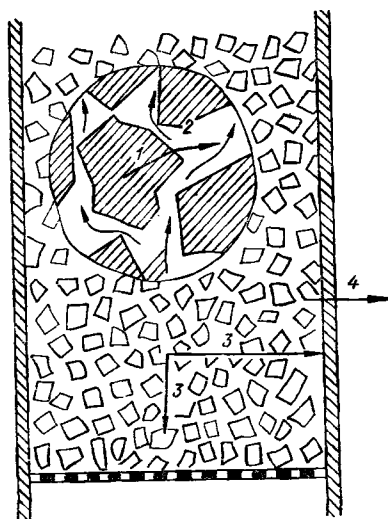


Рис. 1.1 Схема процессов переноса в слое (1—4 этапы переноса).

мическое превращение протекает на развитой внутренней поверхности катализатора и сопровождается процессами переноса вещества и тепла. Среди процессов переноса можно выделить следующие стадии (этапы): 1) перенос тепла и вещества внутри зерна катализатора, 2) перенос тепла и вещества между наружной поверхностью зерен катализатора и потоком газа или жидкости, 3) перенос тепла и вещества по слою катализатора, 4) теплообмен через наружные поверхности, помещенные в слой катализатора.

Таким образом, в общем процессе, идущем в слое катализатора, можно выделить шесть составляющих процесса — химические реакции, сопровождающие их тепловыделение и четыре этапа переноса тепла и вещества. Математическими характеристиками этих процессов являются:

1) скорости химических реакций, зависящих от концентраций компонентов  $C_i$  и температуры  $T - W_j (C, T)$ . Для сложных процессов таких зависимостей должно быть столько, сколько одновременно протекает независимых реакций;

2) тепловые эффекты всех независимых реакций  $Q_j$ ;

3) коэффициенты переноса тепла  $\lambda_z$  и вещества  $D_{zi}$  в зерне катализатора;

4) коэффициенты теплообмена  $\alpha_z$  и массообмена  $\beta_{zi}$  между наружной поверхностью зерна катализатора и потоком;

5) коэффициенты переноса тепла  $\lambda$  и вещества  $D$  по слою. Будем различать коэффициенты переноса в слое в продольном (параллельно массовому потоку газа или жидкости)  $D_L, \lambda_L$  и поперечном направлениях (перпендикулярно массовому потоку  $D_r, \lambda_r$ );

6) коэффициент теплопередачи через теплообменные поверхности в слое  $\alpha_0$ .

Кроме этих этапов, надо принимать во внимание процесс переноса энергии по слою, который будем учитывать коэффициентом гидравлического сопротивления слоя.

Коэффициенты переноса внутри зерна катализатора определяются структурой зерна катализатора и физическими характеристиками реакционной смеси. Коэффициенты переноса у поверхности зерна в слое и у стенки зависят также от гидродинамической обстановки. Последняя для гетерогенных систем различна в различных точках слоя, т. е., как говорят, флуктуирует около некоторых своих средних значений. Поэтому эти коэффициенты определяются не только структурой слоя, физическими характеристиками реакционной смеси и характером потока, но и местоположением в слое, т. е. в общем виде являются не постоянными параметрами слоя, а некоторыми функциями от физических свойств реакционной смеси, которые меняются в результате протекания реакций и в зависимости от места положения в слое. Коэффициент сопротивления также может быть переменным по слою.

### Общий вид математического описания каталитических процессов

На основе рассмотренных выше элементарных процессов, протекающих в слое катализатора, стационарное состояние последнего можно описать следующей системой уравнений:

$$\operatorname{div} (D_i \operatorname{grad} C_i^{\circ 6}) - \operatorname{div} (V C_i^{\circ 6}) + \beta_{zi} (C_i^{\circ 6} - C_i^n) = 0, \quad (1.1)$$

$$\beta_{zi} (C_i^{\circ 6} - C_i^n) + V_z C_i^n \sum_j W_j (C_1^n, \dots, T^n) = 0, \quad (1.2)$$

$$\operatorname{div} (\lambda \operatorname{grad} T^{\circ 6}) - \operatorname{div} (V c_p T^{\circ 6}) - \alpha_z (T^{\circ 6} - T^n) = 0, \quad (1.3)$$

$$\alpha_z (T^{\circ 6} - T^n) + V_z c_p T^n + \sum_j Q_j W_j (C_1^n, \dots, T^n) = 0, \quad (1.4)$$

$$\rho \overrightarrow{\operatorname{grad}} V + \operatorname{grad} P - \mu \operatorname{div} (\operatorname{grad} V) = 0. \quad (1.5)$$

Здесь  $C_i^{\circ 6}$ ,  $C_i^n$  — концентрация компонентов в объеме потока и у поверхности катализатора;

$T^{\circ 6}$ ,  $T^n$  — температура потока и поверхности катализатора;

$D_i$  — коэффициент диффузии в слое;

$V$  — скорость потока;

$\beta_{zi}$  — коэффициент массообмена  $i$ -го компонента между потоком и поверхностью зерна катализатора;



$V_3$  — гидродинамический поток к поверхности катализатора;  
 $W_j(C_1^n, \dots, T^n)$  — скорости реакций на поверхности катализатора;  
 $\nu_i$  — стехиометрический коэффициент;  
 $\lambda$  — коэффициент теплопроводности слоя;  
 $c_p$  — теплоемкость реакционной среды;  
 $\alpha_3$  — коэффициент теплоотдачи от поверхности катализатора в поток;  
 $Q_j$  — тепловой эффект  $j$ -ой реакции;  
 $\rho, \mu$  — плотность и вязкость потока;  
 $P$  — давление.

Граничные условия этой системы уравнений будут рассмотрены ниже. Поскольку вид уравнений материального баланса одинаков для всех компонентов смеси, то в дальнейшем индекс  $i$  будем опускать.

В уравнении (1.1) первый член характеризует диффузионный перенос вещества по слою, второй — перенос вещества с потоком, третий — перенос реагентов к поверхности катализатора (или продуктов от поверхности), где происходит собственно химическое превращение. В уравнении (1.2) первый член, как и третий в (1.1), описывает обмен вещества между поверхностью катализатора и потоком, второй член — перенос компонента к поверхности гидродинамическим потоком, третий член — скорость химического превращения на поверхности катализатора.

Уравнения (1.3) и (1.4) — уравнения теплового баланса. В (1.3) первый член описывает перенос тепла по слою теплопроводностью, второй — перенос тепла потоком, третий член — теплообмен между потоком и поверхностью катализатора. В уравнении (1.4) второй член описывает перенос тепла гидродинамическим потоком, третий — тепловыделение (или теплопоглощение) на поверхности, сопровождающее химическое превращение. Суммарный тепловой эффект всей реакции  $\sum Q_j W_j(C_1^n, \dots, T^n)$  будем в дальнейшем обозначать как  $Q_0 W_0(C_1^n, \dots, T^n)$ , а скорость реагирования компонента  $i$   $\sum \nu_i W_j(C_1^n, \dots, T^n)$  — как  $W_i(C_1^n, \dots, T^n)$ .

Последнее уравнение системы (1.5) — уравнение сохранения энергии, аналогичное уравнению движения вязкой жидкости. Первый член его отвечает изменению энергии потока, второй — затратам энергии потока на преодоление гидравлического сопротивления, третий — затратам энергии на преодоление сил трения.

К этой системе надо добавлять еще краевые и граничные условия. Однако системе уравнений (1.1) — (1.5) трудно решать в общем виде даже с помощью современных вычислительных машин. Иногда в этом и нет необходимости. Отдельные составляющие процесса в определенных условиях вносят небольшой вклад в общую картину процесса, и их можно не учитывать. Поэтому рационально также ставить и разрешать задачи частного характера, в которых можно сделать большее количество допущений, не делая при этом большой ошибки и не теряя физической сущности задачи, но вместе с тем резко упрощая ее. Такое упрощение оправдано и с точки зрения методики, так как общая задача в этом случае распадается на ряд частных, более конкретных задач, которые при условии, что методика их решения разработана, могут служить целям расчета конкретных процессов и аппаратов.

Не будем проводить подробный анализ системы (1.1) — (1.5) и перейдем к описанию частных случаев, которые возникают при практическом применении методов математического моделирования каталитических процессов.

### § 3. ПРОЦЕСС НА ЗЕРНЕ КАТАЛИЗАТОРА

В процессе на зерне катализатора можно выделить две стадии переноса вещества и тепла: 1) между наружной поверхностью зерен катализатора и реакционным потоком, 2) внутри зерна катализатора. Рассмотрим несколько вариантов математических описаний, которые практически встречаются при моделировании процесса на одном зерне. Рассматривать будем только шарообразные зерна, считая, что зерна другой конфигурации можно тем или иным способом представить в виде эквивалентного шара. Не будем учитывать и гидродинамический поток, возникающий вследствие изменения объема реакционной смеси (температурного или в результате изменения числа молей в химических реакциях). Учет этого — стефановского — потока не вносит принципиальных затруднений в методику расчета процесса на вычислительных машинах. Как можно будет увидеть ниже, последнее обстоятельство только несколько изменяет коэффициенты в вычислительной схеме задачи, не меняя принципиального алгоритма его решения [5—7].

а) Математическое описание процесса на зерне катализатора в общем виде учитывает все процессы переноса тепла и вещества.

Считая, что шарик — зерно катализатора — обладает центральной симметрией, используем сферическую систему координат:

$$\begin{aligned} D_3 \left( \frac{d^2 C}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dC}{dr} \right) + W(C, T) &= 0, \\ \lambda_3 \left( \frac{d^2 T}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dT}{dr} \right) + Q_0 W_0(C, T) &= 0, \end{aligned} \quad (1.6)$$

где  $D_3$  — коэффициенты диффузии в зерне;

$\lambda_3$  — коэффициент теплопроводности зерна;

$r$  — текущий радиус.

Из условий симметрии в центре зерна следуют граничные условия: при  $r=0$ :

$$\frac{dC}{dr} = \frac{dT}{dr} = 0. \quad (1.7)$$

У наружной поверхности (при  $r=R_0$ ) граничные условия определяются из следующего: количества тепла и вещества, подводимые к поверхности катализатора изнутри зерна теплопроводностью и диффузией, должны быть равны соответственно потокам тепла и вещества вследствие тепло- и массообмена между поверхностью и реакционным потоком: при  $r=R_0$ .

$$\begin{aligned} -\lambda_3 \frac{dT}{dr} &= \alpha_s (T - T_n), \\ -D_3 \frac{dC}{dr} &= \beta_s (C - C_n), \end{aligned} \quad (1.8)$$

где  $C_n$  и  $T_n$  — концентрация и температура в потоке. Приведя независимую координату  $r$  к безразмерному виду  $\rho = r/R_0$ , преобразуем систему (1.6) — (1.8):

$$\begin{aligned} \left( \frac{d^2 C}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dC}{d\rho} \right) + \Pi_D^s W(C, T) &= 0; \\ \left( \frac{d^2 T}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dT}{d\rho} \right) + \Pi_T^s Q_0 W_0(C, T) &= 0 \end{aligned} \quad (1.9)$$

при  $\rho=0$

$$\frac{dC}{d\rho} = \frac{dT}{d\rho} = 0;$$

при  $\rho=1$

$$\begin{aligned}\frac{dC}{d\rho} &= \gamma_D (C_n - C); \\ \frac{dT}{d\rho} &= \gamma_T (T_n - T),\end{aligned}\tag{1.10}$$

где

$$\Pi_D^3 = \frac{R_0^2}{D_3}; \quad \Pi_T^3 = \frac{R_0^2}{\lambda_3}; \quad \gamma_D = \frac{\beta_3 R_0}{D_3}; \quad \gamma_T = \frac{\alpha_3 R_0}{D_3}.$$

В дальнейшем будут использованы уравнения вида (1.9), (1.10).

б) Теплопроводность зерна катализатора определяется в основном теплопроводностью материала зерна, а перенос вещества диффузией в порах зерна катализатора.

Соответствующие коэффициенты переноса могут различаться между собой при этом в несколько десятков раз. Поэтому практически в большинстве случаев зерно катализатора работает изотермически [7, 8]. Кроме того, на зерне катализатора возможны 1) устойчивые стационарные состояния с небольшими перепадами температур и концентрацией, что соответствует кинетической, внутридиффузионной или переходной между ними области протекания процесса, или 2) устойчивые стационарные состояния, при которых скорость процесса определяется внешней диффузией [7, 9]. Внешнедиффузионные процессы можно рассчитывать по уравнению вида (1.9). Практически в большинстве случаев приходится рассчитывать изотермический процесс на зерне катализатора при условии равенства концентрации и температур в реакционном потоке и у поверхности зерна катализатора. В такой постановке задачи процесс на зерне катализатора математически описывается следующей системой уравнений с граничными условиями:

$$\left( \frac{d^2 C}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dC}{d\rho} \right) + \Pi_D^3 W(C) = 0, \tag{1.11}$$

$$\text{при } \rho = 0 \quad \frac{dC}{d\rho} = 0;$$

$$\text{при } \rho = 1 \quad C = C_n.$$

В результате моделирования процесса на зерне катализатора определяется скорость процесса на зерне, т. е. скорость химического превращения с наложенными эффектами переноса тепла и вещества. В кинетической области скорость равна скорости реакции. Во внутридиффузионной и переходной областях скорость химического превращения определяется через скорость реакции, умноженную на степень использования внутренней поверхности, или фактор эффективности [10, 11]. Степень использования внутренней поверхности зависит от концентрации реагентов в потоке, температуры и активности катализатора, коэффициентов диффузии и теплопроводности. Поэтому вид концентрационной и температурной зависимости скорости превращения отличается от соответствующих зависимостей для скорости реакции. Изменению вида этих зависимостей посвящен ряд работ (см., например, [10—18]), и этот вопрос обсуждать не будем.

Во внешнедиффузионной области скорость процесса определяется скоростью тепло- и массообмена между поверхностью катализатора и

потоком, и поэтому наблюдаемая скорость превращения основного компонента

$$W_{\text{набл}} = \beta_3 C_{\text{п}}. \quad (1.12)$$

Для дальнейшего рассмотрения процесса в слое катализатора необходимо знание наблюдаемой скорости химического превращения на зерне катализатора.

#### § 4. КВАЗИГОМОГЕННАЯ МОДЕЛЬ НЕПОДВИЖНОГО СЛОЯ КАТАЛИЗАТОРА

Для описания процесса в слое катализатора используются различные модели. Наиболее распространённые — квазигомогенная (или диффузионная) [19—30], ячеистая [31—34] и канальчатая [35—36]. Квазигомогенная модель чаще всего используется для анализа и расчета процессов. По этой модели гетерогенный слой катализатора представляется в виде проницаемой сплошной среды, через которую течет поток газа. В этой среде протекает химическая реакция со скоростью, равной наблюдаемой скорости превращения. Эта среда характеризуется эффективными коэффициентами диффузии и теплопроводности.

Ячеистая и канальчатая модели чаще используются для объяснения механизма переноса тепла и вещества в слое, причем, как правило, указывается связь между основными параметрами ячеистой и капиллярной модели, с одной стороны, и эффективным коэффициентом диффузии квазигомогенной модели, с другой стороны (см., например, [33—35]), хотя не всегда можно эту связь установить однозначно [37]. Но несоответствие модели, объясняющей механизм процессов переноса, и квазигомогенной модели, можно учесть путем введения переменных по слою коэффициентов переноса. Действительно, микроэлементом слоя катализатора является объем, занимаемый примерно одним зерном катализатора. Такая элементарная ячейка многократно повторяется в слое, и характер процессов, происходящих в этой ячейке, определяет характер процессов в слое. Если размеры элементарной ячейки много меньше размеров слоя, то элементарные процессы, происходящие в ней, можно усреднить и пользоваться усредненными коэффициентами переноса для всего слоя. При этом флуктуации значений коэффициентов относительно их усредненных значений будут невелики, ими можно пренебречь и коэффициенты можно считать постоянными.

Однако если размеры ячеек не сильно отличаются от размеров самого слоя (например, диаметр трубки только в 4—6 раз больше диаметра зерен засыпанного в нее катализатора), то флуктуации усредненных величин будут заметными, и это надо учитывать. Во всяком случае, для моделирования каталитических процессов можно создать квазигомогенную модель, которая с достаточной точностью будет описывать протекание химико-технологического процесса в слое катализатора. Это подтверждается опытом моделирования ряда промышленных процессов. Кроме того, использование такой модели удобно и методологически как с точки зрения анализа уравнений математического описания процессов, так и с точки зрения, как увидим в дальнейшем, разработки методов моделирования процессов на электронных вычислительных машинах.

В дальнейшем будем считать, что необходимые коэффициенты в уравнениях математического описания известны, и поэтому будем касаться только классификации уравнений по методам их решения на ЭВМ.

В квазигомогенной модели процесс, протекающий в неподвижном слое катализатора, в самом общем виде описывается уравнениями в частных производных параболического типа с членами, учитывающими внутренние источники тепла и вещества:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(D \operatorname{grad} C) - \operatorname{div}(VC) + W(C, T) &= 0, \\ \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T) - \operatorname{div}(Vc_p T) + Q_0 W_0(C, T) &= 0 \end{aligned} \quad (1.13)$$

или

$$\begin{aligned} \nabla(D \nabla C) - \nabla(VC) + W(C, T) &= 0, \\ \nabla(\lambda \nabla T) - \nabla(Vc_p T) + Q_0 W_0(C, T) &= 0. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Выразив лапласиан  $\nabla$  через производные в цилиндрической системе координат, получим (в случае осевой симметрии)

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( D_r r \frac{dC}{dr} \right) + \frac{\partial}{\partial l} \left( D_l \frac{\partial C}{\partial l} \right) - \frac{\partial}{\partial l} (VC) + W(C, T) &= 0, \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \lambda_r r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial l} \left( \lambda_l \frac{\partial T}{\partial l} \right) - \frac{\partial}{\partial l} (Vc_p T) + Q_0 W_0(C, T) &= 0. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Прежде чем перейти к рассмотрению частных случаев системы (1.15), обратим внимание на одну особенность использования подобной системы.

Если использовать непосредственно систему уравнений (1.15), то при раскрытии выражения  $\frac{\partial}{\partial l}(Vc_p T)$  в последнем уравнении появляется член  $T \frac{\partial(Vc_p)}{\partial l}$ . Значение его и соответственно решение уравнения, вообще говоря, зависит от системы отсчета температуры, т. е. от шкалы температур. Но при определении исходной системы уравнений нигде не оговаривалось, какая шкала температур используется, и при практическом использовании системы (1.15) для расчетов (как и последующих, вытекающих из (1.15)) надо принимать во внимание следующее положение химической термодинамики.

Следуя закону Гесса — тепловой эффект процесса не зависит от промежуточных стадий, а определяется лишь начальным и конечным состояниями системы, — можно представить процесс, протекающий в элементе объема  $dv_k$  рассматриваемой системы, следующим образом. Температура реакционной смеси на входе в объем  $dv_k$  равна  $T$ . Охладив реакционную смесь до некоторой температуры  $T^*$  и проведя реакцию при этой температуре, нагреем смесь до температуры  $T + dT$ , соответствующей температуре выхода ее из элемента  $dv_k$ . Следовательно, вместо члена  $\frac{\partial}{\partial l}(Vc_p T)$  надо пользоваться членом вида  $\frac{\partial}{\partial l}[Vc_p(T - T^*)]$ , но тепловой эффект  $Q_0$  определять при температуре  $T^*$  и не учитывать его зависимость от температуры. Конечно, можно пользоваться членом вида  $\frac{\partial}{\partial l}(Vc_p T)$ , но тепловой эффект при этом надо определять при условии  $T=0$  и использовать среднеинтегральные значения температур в интервале  $0 \div T$ .

В дальнейшем при рассмотрении уравнений с переменными коэффициентами будем принимать начало отчета температуры от некоторой точки  $T^*$  и тепловой эффект считать не зависящим от температуры и определенным при  $T^*$ .

Если коэффициенты диффузии и теплопроводности, скорость потока и теплоемкость меняются по слою незначительно, так что их можно принять постоянными, то система (1.15) упрощается:

$$\begin{aligned} D_r \left( \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) + D_l \frac{\partial^2 C}{\partial l^2} - V \frac{\partial C}{\partial l} + W(C, T) = 0, \\ \lambda_r \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \lambda_l \frac{\partial^2 T}{\partial l^2} - V c_p \frac{\partial T}{\partial l} + Q_0 W_0(C, T) = 0. \end{aligned} \quad (1.16)$$

В дальнейшем будут использованы безразмерные координаты  $\rho = \frac{r}{R_0}$  и  $\xi = \frac{l}{L}$ , где  $R_0, L$  — радиус и длина слоя. Тогда система уравнений (1.16) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} P_D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial C}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{Pe_D} \frac{\partial^2 C}{\partial \xi^2} - \frac{\partial C}{\partial \xi} + \omega(C, T) = 0, \\ P_T \left( \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{Pe_T} \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) = 0, \end{aligned} \quad (1.17)$$

где  $P_D = \frac{D_r L}{VR_0^2}$ ;  $P_T = \frac{\lambda_r L}{V c_p R_0^2}$  — параметры радиального переноса;  
 $Pe_D = \frac{LV}{D_l}$ ;  $Pe_T = \frac{LV c_p}{\lambda_l}$  — параметры продольного переноса;  
 $\omega(C, T) = \frac{L}{V} W(C, T).$

Преобразование уравнения с переменными коэффициентами (1.15) к виду с безразмерными координатами дано ниже для частных случаев. Краевые условия будут рассмотрены также ниже для частных случаев.

В последних уравнениях не приведено уравнение движения вязкой жидкости. Его обычно записывают в виде уравнения гидравлического сопротивления слоя

$$\frac{dP}{dl} = \kappa, \quad (1.18)$$

где  $\kappa$  — коэффициент трения, зависящий от структуры слоя, скорости и температуры потока, его физических характеристик. Коэффициент  $\kappa$  можно определить по известным формулам (см., например, [39]).

Последнее уравнение сказывается на изменении таких параметров слоя, как молярные концентрации реагентов, скорость потока, что, в свою очередь, определяет коэффициенты переноса, скорость реакций.

Следовательно, уравнение гидравлического сопротивления только помогает установить характер изменения коэффициентов модели, не вносит никаких принципиальных изменений в уравнение теплового и материального баланса и не меняет методов решения их. Поэтому ниже уравнение (1.18) не будет больше упоминаться.

Теперь рассмотрим частные случаи задач (1.15) и (1.17). При этом будут одновременно сформулированы и краевые условия всех задач. Вопросы допустимости тех или иных упрощений обсуждаются в специальной литературе [27, 40—45].

## § 5. ЧАСТНЫЕ СЛУЧАИ НЕПОДВИЖНОГО СЛОЯ КАТАЛИЗАТОРА

### Радиальный перенос в круглой трубке

При значениях параметра  $Pe_T > 200$  продольное смещение можно не учитывать и при расчетах пренебрегать членом, содержащим вторую производную по  $\xi$ . В таком предположении уравнения (1.17) преобразу-

ются к следующей системе, описывающей процесс в проточной трубке с учетом радиальной диффузии и теплопроводности:

$$\begin{aligned} \Pi_D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial C}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial C}{\partial \xi} + \omega(C, T) &= 0, \\ \Pi_T \left( \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) &= 0. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Начальные условия: при  $\xi=0$ ,  $T=T_0$ ,  $C=C_0$ .

Вследствие осевой симметрии граничные условия на оси трубки при  $\rho=0$  определяются выражениями:

$$\frac{\partial T}{\partial \rho} = \frac{\partial C}{\partial \rho} = 0. \quad (1.20)$$

Стенка трубки для вещества непроницаема. Поэтому при  $\rho=1$

$$\frac{\partial C}{\partial \rho} = 0. \quad (1.21)$$

Тепловой поток, подводимый к стенке трубки от слоя вследствие теплопроводности последнего, должен быть равен тепловому потоку, отводимому от стенки процессами теплопередачи: при  $\rho=1$

$$-\lambda_R \frac{\partial T}{\partial r} = \alpha_0 (T - T_x), \quad (1.22)$$

где  $\alpha_0$  — коэффициент теплопередачи через стенку;

$T_x$  — температура окружающей среды (холодильник, термостат, подогреватель и т. д.).

Преобразовав начальные и краевые условия к другим переменным, получим при  $\xi=0$

$$T=T_0; \quad C=C_0,$$

при  $\rho=0$

$$\frac{\partial T}{\partial \rho} = \frac{\partial C}{\partial \rho} = 0, \quad (1.23)$$

при  $\rho=1$

$$\frac{\partial C}{\partial \rho} = 0; \quad \Pi_T \frac{\partial T}{\partial \rho} = \gamma (T_x - T),$$

где  $\gamma = \frac{\alpha_0 L}{c_p R_0 V}$ .

Если параметры  $\Pi_D$  и  $\Pi_T$  непостоянные по слою, то систему (1.19) в соответствии с (1.15) преобразуем к виду:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \Pi_D \rho \frac{\partial C}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{V}{V_0} C \right) + \omega(C, T) &= 0, \\ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \Pi_T \rho \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{V}{V_0} \cdot \frac{c_p}{c_p^0} \cdot T \right) + Q_0 \omega_0(C, T) &= 0. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Начальные и краевые условия сохраняют вид (1.23). Здесь в  $\Pi_D$  и  $\Pi_T$  входят скорость  $V_0$  и теплоемкость  $c_p^0$  для исходной реакционной смеси.

### Поперечный перенос в межтрубном пространстве

В ряде каталитических реакторов с внутренним теплообменом катализатор находится в межтрубном пространстве, а охлаждающая среда течет в трубках (например, в реакторах синтеза аммиака, синтеза метанола).

Рассмотрим межтрубное пространство, образованное трубками, расположенными по вершинам правильных треугольников (рис. 1.2). Поскольку трубки все распределены в плоскости поперечного сечения равномерно, будем рассматривать процесс, происходящий в треугольной пирамиде, поперечное сечение которой показано на рис. 1.2 заштрихованной площадью и высота которой равна высоте слоя. Для рассматриваемого случая равномерного окружения каждой трубки шестью другими трубками можно также выбрать цилиндрическую систему координат, ограничившись площадью, показанной на рис. 1.2 более плотной штриховкой. Но охлаждение трубкой не имеет осевой симметрии, и лапласиан должен включать производную по угловой координате  $\varphi$ . Для этого случая система уравнения (1.14) преобразуется к виду (без учета продольного переноса):

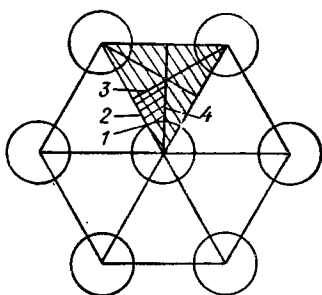


Рис. 1.2. Схема расположения трубок по вершинам правильных треугольников (1—4 — границы области расчета процесса).

$$\begin{aligned} \Pi_D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial C}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 C}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{\partial C}{\partial \xi} + \omega(C, T) &= 0, \\ \Pi_T \left( \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) &= 0. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Здесь

$$\Pi_D = \frac{D_r L}{VR_0^2}; \quad \Pi_T = \frac{\lambda_r L}{Vc_p R_0^2};$$

$R_0$  равно половине «шага» трубок. Начальные условия: при  $\xi=0$

$$T = T_0; \quad C = C_0. \quad (1.26)$$

Краевые условия на границах, которыми вырезается рассматриваемая область (границы 2, 3, 4 на рис. 1.2), определяются из условий симметрии задачи относительно этих границ, т. е. на границе 2, 4

$$\frac{\partial C}{\partial \varphi} = \frac{\partial T}{\partial \varphi} = 0; \quad (1.27)$$

на границе 3

$$\frac{\partial C}{\partial n} = \frac{\partial T}{\partial n} = 0.$$

где  $n$  — нормаль к границе 3.

Краевые условия на стенке трубки (граница 1) определяются условиями непроницаемости стенки для вещества и непрерывностью теплового потока через стенку на границе 1 при  $\rho = \rho_1$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial \rho} &= 0, \\ -\Pi_T \frac{\partial T}{\partial \rho} &= \gamma(T - T_x), \end{aligned} \quad (1.28)$$

где  $\rho_1 = R_1/R_0$ ;  $R_1$  — радиус трубки.

### Продольное смещение

В узких трубках можно пренебречь перепадом температур и концентраций по радиусу, считая их постоянными, и для расчета процесса использовать одномерную модель с учетом продольного смещения.



В таком приближении исходная система уравнений (1.17) преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\text{Pe}_D} \frac{d^2 C}{d\xi^2} - \frac{dC}{d\xi} + \omega(C, T) &= 0, \\ \frac{1}{\text{Pe}_T} \frac{d^2 T}{d\xi^2} - \frac{dT}{d\xi} + \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) - B(T - T_x) &= 0. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Для процесса с изменяющимися по длине слоя параметрами исходное уравнение (1.15) имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left( \frac{1}{\text{Pe}_D} \cdot \frac{dC}{d\xi} \right) - \frac{d}{d\xi} \left( \frac{V}{V_0} C \right) + \omega(C, T) &= 0, \\ \frac{d}{d\xi} \left( \frac{1}{\text{Pe}_T} \frac{dT}{d\xi} \right) - \frac{d}{d\xi} \left( \frac{V}{V_0} \frac{c_p}{c_p^0} T \right) + \frac{Q_0}{c_p^0} \omega_0(C, T) - B(T - T_x) &= 0, \end{aligned} \quad (1.30)$$

$V_0$  и  $c_p^0$  — относятся к исходной реакционной смеси;

$B = \frac{2\alpha_0 L}{c_p^0 R_0 V_0}$  — параметр теплоотвода.

Краевые условия задачи (1.29) неоднократно обсуждались рядом авторов (см. [46—49]). Сравнение различных предлагавшихся условий было выполнено в [50], где показано, что наиболее правильно физические закономерности процесса в слое отражают следующие краевые условия: при  $\xi=0$

$$\frac{dC}{d\xi} = \text{Pe}_D (C - C_0); \quad \frac{dT}{d\xi} = \text{Pe}_T (T - T_0), \quad (1.31)$$

при  $\xi=1$

$$\frac{dC}{d\xi} = \frac{dT}{d\xi} = 0.$$

### Идеальное вытеснение

Уравнения (1.15) ÷ (1.31) позволяют рассчитывать поле температур и концентраций в слое катализатора. Однако практически в большинстве случаев расчет процесса в слое катализатора по уравнениям вида (1.15) ÷ (1.31) проводится на первых этапах моделирования, когда изучаются характер и особенности протекания процесса в слое. На этих этапах важно знание поля температур и концентраций в слое. Для дальнейших этапов моделирования (оптимизация, определение параметрической чувствительности и т. д.) иногда нет необходимости использовать полные уравнения, описанные выше. Как правило, здесь можно использовать уравнения модели слоя идеального вытеснения. Их легко получить из системы (1.29), считая, что продольное смешение пренебрежимо мало:

$$\begin{aligned} \frac{dC}{d\xi} &= \omega(C, T), \\ \frac{dT}{d\xi} &= \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) - B(T - T_x). \end{aligned} \quad (1.32)$$

Граничные условия определены в начале слоя — заданы концентрации и температура на входе в слой: при  $\xi=0$

$$C = C_0; \quad T = T_0.$$

Если некоторые параметры процесса (теплоемкость, коэффициент теплопередачи, скорость газа и т. д.) меняются по слою, то уравнения слоя идеального вытеснения получаются из системы (1.30):

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\xi} \left( \frac{V}{V_0} C \right) &= \omega(C, T), \\ \frac{d}{d\xi} \left( \frac{V}{V_0} \frac{c_p}{c_p^0} T \right) &= \frac{Q_0}{c_p^0} \omega_0(C, T) - B(T - T_x).\end{aligned}\quad (1.33)$$

Преобразуем систему (1.33) к другому виду, обозначив индексом «\*» величины, относящиеся к реагирующим смесям при нормальных условиях. Для смеси идеальных газов можно написать следующие соотношения:

$$\begin{aligned}Vc &= V^*c^* = V_0C_0x, \\ V_T &= V^*\gamma^* = V_0\gamma_0,\end{aligned}$$

где  $x$  — степень превращения компонент.

$$\begin{aligned}\frac{dx}{d\xi} &= \frac{L}{V_0} \frac{W(x, C_0, T)}{C_0}, \\ \frac{d}{d\xi} \left( \frac{c_{p, \text{век}}}{c_{p, \text{век}}^0} T \right) &= \frac{Q_0 C_0}{c_{p, \text{век}}^0} \cdot \frac{L}{V_0} \cdot \frac{W(x, C_0, T)}{C_0} - B(T - T_x).\end{aligned}\quad (1.34)$$

Параметр  $\frac{Q_0 C_0}{c_{p, \text{век}}^0} = \Delta T_{\text{ад}}$  называется величиной адиабатического разогрева.

Обозначив относительное изменение теплоемкости реакционного потока в результате протекания процесса

$$\frac{c_{p, \text{век}}}{c_{p, \text{век}}^0} = \delta c_{p, \text{век}}, \quad (1.35)$$

раскроем левую часть второго уравнения системы (1.34).

Напомним, что за начало отсчета температуры при раскрытии этого выражения берется температура  $T^*$ . Поэтому появляется член  $T - T^*$ . При температуре  $T^*$  определяются также тепловые эффекты реакций  $Q$ . Используя

$$\frac{d(\delta c_{p, \text{век}})}{d\xi} = \frac{\partial(\delta c_{p, \text{век}})}{\partial x} \cdot \frac{dx}{d\xi} + \frac{\partial(\delta c_{p, \text{век}})}{\partial T} \frac{dT}{d\xi},$$

получим окончательное описание процесса в слое идеального вытеснения с переменными коэффициентами

$$\begin{aligned}\frac{dT}{d\xi} \left[ \delta c_{p, \text{век}} + (T - T^*) \frac{\partial(\delta c_{p, \text{век}})}{\partial T} \right] &= \left[ \Delta T_{\text{ад}} - (T - T^*) \frac{\partial(\delta c_{p, \text{век}})}{\partial x} \right] \times \\ &\times \frac{L}{V_0} \frac{W(x, C_0, T)}{C_0} - B(T - T_x), \\ \frac{dx}{d\xi} &= \frac{L}{V_0} \frac{W(x, C_0, T)}{C_0}.\end{aligned}\quad (1.36)$$

Здесь уравнение написано для одного компонента.

Начальные условия для системы (1.36) также определяются условиями на входе в слой катализатора, т. е. при  $\xi=0$  заданы начальные концентрации  $C_0$ , следовательно,  $x_0$  и температура входящей реакционной смеси  $T_0$ .

Температура охлаждения  $T_x$  задана или меняется по какому-то закону. Например, если катализатор находится в трубках, а в межтрубном пространстве циркулирует теплоноситель, то изменение его температуры можно представить уравнением

$$\pm \frac{dT_x}{d\xi} = B_1 (T - T_x), \quad (1.37)$$

где

$$B_1 = \frac{\sigma_0 S_{уд}^T L}{c_p^T V_T},$$

$S_{уд}^T$  — удельная поверхность охлаждения, отнесенная к объему межтрубного пространства;

$c_p^T$  — объемная теплоемкость теплоносителя.

Знак перед производной будет положительным, если направления потоков реакционной смеси и теплоносителя одинаковы, и отрицательным, если направления потоков противоположны.

Поскольку теплоемкость теплоносителя много больше теплоемкости реакционной смеси, температура первого меняется, как правило, незначительно и ее во многих случаях можно принимать постоянной (см., например, [51, 52]).

### Автотермический слой идеального вытеснения с внутренним теплообменом

В предыдущем разделе было рассмотрено математическое описание слоя идеального вытеснения с теплообменом посторонним теплоносителем. В химической промышленности используются реакторы, в которых теплоносителем является реакционная смесь (рис. 1.3). В этих аппаратах

реакционная смесь, прежде чем попасть в слой катализатора, нагревается в трубках за счет тепла реакции, одновременно отводя тепло из реакционной зоны. По общему виду уравнения, описывающие процесс в таком аппарате, не отличаются от (1.32), (1.37). Отличие состоит в определении некоторых коэффициентов и — это основное — в граничных условиях.

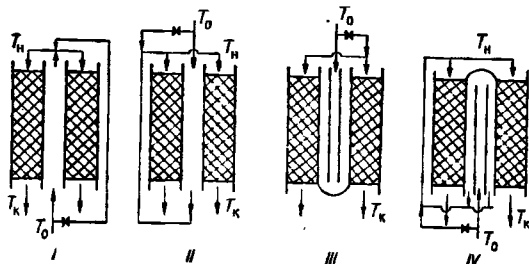


Рис. 1.3. Автотермические аппараты с внутренним теплообменом.

Трубки: I — простые противоточные; II — простые прямоточные; III — двойные противоточные; IV — двойные прямоточные.

Первая схема, показанная на рис. 1.3, — аппарат с простыми противоточными трубками — описывается системой уравнений, аналогичной (1.32), (1.37) (будем рассматривать процессы с постоянными характеристиками по длине аппарата):

$$\begin{aligned} \frac{dC}{d\xi} &= \omega(C, T), \\ \frac{dT}{d\xi} &= \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) - B(T - Q), \\ -\frac{dQ}{d\xi} &= \frac{B}{\beta} (T - Q). \end{aligned} \quad (1.38)$$

Здесь  $\theta$  — температура в трубках;

$$B = \frac{\alpha_0 S_{yA} L}{c_p V_0} = \frac{\alpha_0 F}{c_p V_{06}};$$

$S_{yA}$  — удельная поверхность охлаждения,  $m^2$ ;

$V_{06}$  — объемная скорость газа,  $m^3/сек$ ;

$\beta$  — доля газа, идущая по трубкам.

Начало координат взято в точке входа реакционной смеси в слой катализатора.

Температура реакционной смеси на входе в аппарат задана и равна  $T_0$ , т. е. при  $\xi=1$

$$\Theta = T_0. \quad (1.38a)$$

Другое граничное условие определяется в сечении входа реакционной смеси в слой катализатора, где происходит смешение нагретого потока, прошедшего через трубки, и холодного байпасса: при  $\xi=0$

$$T = \beta\Theta + (1 - \beta)T_0. \quad (1.38б)$$

В этой точке также задан начальный состав реакционной смеси: при  $\xi=0$

$$C = C_0. \quad (1.38в)$$

Если вся реакционная смесь проходит через трубки (нет холодного байпасса), то при  $\xi=0$

$$T = \Theta, \quad C = C_0.$$

Аналогичным образом получим математические описания процессов для остальных схем аппаратов.

Схема II (рис. 1.3) — аппарат с простыми прямоточными трубками:

$$\begin{aligned} \frac{dC}{d\xi} &= \omega(C, T), \\ \frac{dT}{d\xi} &= \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) - B(T - \Theta), \\ \frac{d\Theta}{d\xi} &= \frac{B}{\beta} (T - \Theta). \end{aligned} \quad (1.39)$$

$$\begin{aligned} C|_{\xi=0} &= C_0, \\ \Theta|_{\xi=0} &= T_0, \end{aligned} \quad (1.39a)$$

$$T|_{\xi=0} = \beta\Theta|_{\xi=1} + (1 - \beta)T_0.$$

Схема III (рис. 1.3) — аппарат с двойными противоточными трубками:

$$\begin{aligned} \frac{dC}{d\xi} &= \omega(C, T), \\ \frac{dT}{d\xi} &= \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) - B(T - \theta_1), \\ -\frac{d\theta_1}{d\xi} &= \frac{B}{\beta} (T - \theta_1) - \frac{B_1}{\beta} (\theta_1 - \theta_2), \\ \frac{d\theta_2}{d\xi} &= \frac{B_1}{\beta} (\theta_1 - \theta_2). \end{aligned} \quad (1.40)$$

Здесь  $\theta_1$  — температура в наружных трубках;

$\theta_2$  — температура во внутренних трубках;

$$B_1 = \frac{\alpha_{вн} S_{yA} L}{c_p V_0};$$

$\alpha_{\text{вн}}$  — коэффициент теплопередачи для внутренних трубок;  
 $S_{\text{уд}}^{\text{вн}}$  — удельная поверхность внутренних трубок, отнесенная к объ-  
 ему катализатора.

Граничные условия:

$$\begin{aligned} C|_{\xi=0} &= C_0, \\ \theta_2|_{\xi=0} &= T_0, \\ \theta_1|_{\xi=1} &= \theta_2|_{\xi=1}, \\ T|_{\xi=0} &= \beta\theta_1|_{\xi=0} + (1-\beta)T_0. \end{aligned} \quad (1.40a)$$

Схема IV (рис. 1.3) — аппарат с двойными прямоточными труб-  
 ками:

$$\begin{aligned} \frac{dC}{d\xi} &= \omega(C, T), \\ \frac{dT}{d\xi} &= \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) - B(T - \theta_1), \\ \frac{d\theta_1}{d\xi} &= \frac{B}{\beta} (T - \theta_1) - \frac{B_1}{\beta} (\theta_1 - \theta_2), \\ -\frac{d\theta_2}{d\xi} &= \frac{B_1}{\beta} (\theta_1 - \theta_2). \end{aligned} \quad (1.41)$$

Граничные условия:

$$\begin{aligned} C|_{\xi=0} &= C_0, \\ \theta_2|_{\xi=1} &= T_0, \\ \theta_1|_{\xi=0} &= \theta_2|_{\xi=0}, \\ T|_{\xi=0} &= \beta\theta_1|_{\xi=1} + (1-\beta)T_0. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Возможны различные схемы аппаратов с внутренним теплообменом. Их математическое описание и граничные условия можно получить аналогичным образом. Здесь другие схемы рассматриваться не будут, так как методика их решения принципиально не отличается от метода решения рассмотренных выше уравнений и вычислительная схема может быть легко построена практически для любой схемы аппаратов.

Как видно из математических описаний автотермических аппаратов с внутренним теплообменом, виды уравнений не отличаются от уравнений, описывающих процесс в слое катализатора с посторонним теплоносителем. Однако граничные условия, делающие уравнения определенными, заданы на разных концах слоя (для процесса с посторонним теплоносителем все краевые условия заданы в одной точке — при  $\xi=0$ ). Такое определение краевых условий накладывает, как увидим в дальнейшем, особые требования на выбор метода расчета, и потому эти уравнения выделены в отдельную группу.

## § 6. ПСЕВДООЖИЖЕННЫЙ СЛОЙ КАТАЛИЗАТОРА

Из всего разнообразия моделей псевдоожигенного слоя остановимся на двух, наиболее распространенных, для описания процесса.

### Слой идеального смешения

Это наиболее простое представление псевдооживленного слоя. Для слоя идеального смешения принимается, что перемешивание реакционного потока настолько интенсивно, что температура и концентрации компонентов во всех точках слоя одинаковы. В этом случае процесс описывается системой алгебраических уравнений

$$C_0 - C = \omega(C, T), \quad (1.43)$$

$$T - T_0 = \frac{Q_0}{c_p} \omega(C, T) - B(T - T_x),$$

где  $T_0$ ,  $C_0$  — температура и концентрация на входе в аппарат;  
 $T_x$  — температура теплоносителя;

$B = \frac{\alpha_0 \cdot S_{уд}}{c_p} \tau_k$  — параметр теплоотвода;

$S_{уд}$  — поверхность теплообмена, отнесенная к единице объема;

$\tau_k$  — время контакта;

$\omega(C, T) = \tau_k W(C, T)$ .

Вследствие интенсивной циркуляции частиц катализатора температура в псевдооживленном слое выравнивается, и процесс протекает практически изотермично. Однако перемешивание по газу имеет место далеко не во всех случаях. Кроме того, псевдооживленный слой — система неоднородная, в ней наблюдаются газовые каналы, пузыри, газовые поршни (рис. 1.4, а). Поэтому слой идеального смешения — наиболее простая модель псевдооживленного слоя.

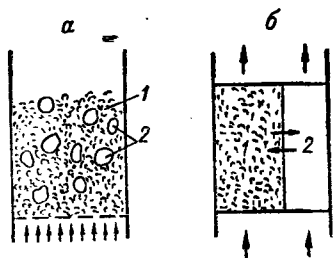


Рис. 1.4. Псевдооживленный слой катализатора.

а — схема псевдооживленного слоя; б — двухфазная модель (1 — плотная фаза, 2 — пузыри).

### Двухфазная модель

Из существующих в настоящее время подходов к расчету процессов в псевдооживленном слое наибольший интерес представляет двухфазная модель [53—56]. По этой модели слой представляют как систему, состоящую из двух фаз (рис. 1.4, б) — относительно плотная масса твердых частиц, через которую фильтруется реакционная смесь, и пузырьковая фаза, в которой отсутствуют твердые частицы. Соответственно в плотной фазе протекает химическая реакция; в пузырьковой — байпасирование реакционной смеси. Между фазами идет непрерывный обмен газом в основном вследствие разрушения и образования пузырей, переноса газа твердыми частицами и т. д.

В самом общем виде двухфазная модель математически также описывается диффузионными уравнениями (для каждой фазы) с источниками вещества. В качестве источников вещества служат химическая реакция (для плотной фазы) и массообмен между фазами. Исследования показали, что для обеих фаз радиальной диффузией можно пренебречь. Также мал продольный диффузионный поток в пузырьковой фазе. Поэтому двухфазная модель описывается следующей системой дифференциальных уравнений (в безразмерной форме):

$$\begin{aligned} \frac{1}{\text{Pe}} \frac{d^2 C_1}{dz^2} - \frac{dC_1}{dz} + \omega(C) - \text{Nu}(C_1 - C_2) &= 0, \\ \frac{dC_2}{dz} - \text{Nu} \frac{q}{1-q}(C_1 - C_2) &= 0. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Основные типы уравнений,

Алгебраическое уравнение (сводится к задаче Коши)	Идеальное смещение*	$C - C_0 = \omega(C, T)$ $T - T_0 = \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) - B(T - T_x) \quad (1)$
Начальная задача (задача Коши)	переменные коэффициенты	$\frac{dx}{d\xi} = \frac{\omega(C, T)}{C_0}$ $\frac{dT}{d\xi} \left[ \delta c_p \text{ вес} + (T - T^*) \frac{\partial (\delta c_p \text{ вес})}{\partial T} \right] =$ $= \left[ \Delta T_{ад} - (T - T^*) \frac{\partial (\delta c_p \text{ вес})}{\partial x} \right] \frac{\omega(C, T)}{C_0} - B(T - T_x)$ $\xi = 0: x = x_0; T = T_0$
	постоянные коэффициенты	$\frac{dc}{d\xi} = \omega(C, T)$ $\frac{dT}{d\xi} = \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) - B(T - T_x)$ $\xi = 0: C = C_0, T = T_0$
Краевая задача (сводится к гиперболическим уравнениям)	Идеальное смещение	$\frac{dC}{d\xi} = \omega(C, T)$ $\frac{dT}{d\xi} = \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) - B(T - \theta)$ $-\frac{d\theta}{d\xi} = \frac{B}{\beta} (T - \theta)$ $\xi = 0: T = \beta\theta + (1 - \beta)T_0, C = C_0; \xi = 1: \theta = T_0$
Смешанная задача	Двухфазная модель псевдооживленного слоя	$\frac{1}{Pe} \frac{d^2 C_1}{d\xi^2} - \frac{dC_1}{d\xi} + \omega(C_1) - Nu(C_1 - C_2) = 0$ $\frac{dC_2}{d\xi} - Nu \frac{q}{1 - q} (C_1 - C_2) = 0 \quad (5)$ $\xi = 0: \frac{dC_1}{d\xi} = Pe(C_1 - C_0), C_2 = C_0; \xi = 1: \frac{dC_1}{d\xi} = 0$

\* Внешнедиффузионная задача описывается также уравнениями (1), но вместо  $\tau = \frac{L}{V_0}$  входят коэффициенты массо- ( $\beta_0$ ) и теплообмена ( $\alpha_0$ ) между потоком и поверхностью зерна.

Таблица 1.1

описывающих каталитические процессы

Сводятся к параболическим уравнениям	процесс на зерне		
	изотермический		
	неизотермический		
	поперечный перенос в круглой трубке		
	поперечный перенос в межтрубном пространстве		
		$\frac{d^2C}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dC}{d\rho} + \frac{R_3^2}{D^*} W(C) = 0$ $\rho = 0: \frac{dC}{d\rho} = 0; \rho = 1: C = C_0$	(6)
		$\frac{d^2C}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dC}{d\rho} + \frac{R_3^2}{D^*} W(C, T) = 0$ $\frac{d^2T}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dT}{d\rho} + \frac{R_3^2}{\lambda^*} Q_0 W_0(C, T) = 0$ $\rho = 0: \frac{dC}{d\rho} = \frac{dT}{d\rho} = 0; \rho = 1: \frac{dC}{d\rho} = \frac{\beta_3 R_3}{D^*} (C_0 - C), \frac{dT}{d\rho} = \frac{\alpha_3 R_3}{\lambda^*} (T_0 - T)$	(6a)
		$\Pi_D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial C}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial C}{\partial \xi} + \omega(C, T) = 0$ $\Pi_T \left( \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) = 0$ $\xi = 0: C = C_0, T = T_0; \rho = 0: \frac{\partial C}{\partial \rho} = \frac{\partial T}{\partial \rho} = 0;$ $\rho = 1: \frac{\partial C}{\partial \rho} = 0, \Pi_T \frac{\partial T}{\partial \rho} = \gamma (T_x - T)$	(7)
		$\Pi_D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial C}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 C}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{\partial C}{\partial \xi} + \omega(C, T) = 0$ $\Pi_T \left( \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) = 0$ $\xi = 0: C = C_0, T = T_0; \rho = r: \frac{\partial C}{\partial \rho} = 0, \Pi_T \frac{\partial T}{\partial \rho} = \gamma (T_x - T);$ $\varphi = 0 \text{ и } \varphi = \frac{\pi}{6}: \frac{\partial C}{\partial \varphi} = \frac{\partial T}{\partial \varphi} = 0; \rho = \frac{1}{\cos \varphi}: \frac{\partial C}{\partial n} = \frac{\partial T}{\partial n} = 0$	(8)
		$\frac{1}{Pe_D} \frac{d^2C}{d\xi^2} - \frac{dC}{d\xi} + \omega(C, T) = 0$ $\frac{1}{Pe_T} \frac{d^2T}{d\xi^2} - \frac{dT}{d\xi} + \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) - B(T - T_x) = 0$ $\xi = 0: \frac{dC}{d\xi} = Pe_D (C - C_0), \frac{dT}{d\xi} = Pe_T (T - T_0); \xi = 1: \frac{dC}{d\xi} = \frac{dT}{d\xi} = 0$	(9)
Общий случай		$\Pi_D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial C}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{Pe_D} \frac{\partial^2 C}{\partial \xi^2} - \frac{\partial C}{\partial \xi} + \omega(C, T) = 0$ $\Pi_T \left( \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{Pe_T} \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{Q_0}{c_p} \omega_0(C, T) = 0$	(10)
		<p>Краевые условия — см. (7) для <math>\rho = 0</math> и <math>\rho = 1</math> и (9) для <math>\xi = 0</math> и <math>\xi = 1</math>.</p> $\nabla(D \nabla C) - \nabla(V C) + W(C, T) = 0$ $\nabla(\lambda \nabla T) - \nabla(V c_p T) + Q_0 W_0(C, T) = 0$	(11)



Здесь индекс «1» относится к плотной фазе, индекс «2» — к пузырьковой.

Параметр  $Pe = \frac{LV_1}{D}$  устанавливает соотношение между конвективным потоком вещества и продольным смещением в плотной фазе ( $V_1$  — скорость потока в плотной фазе,  $L$  — высота слоя).

Критерий межфазного обмена  $Nu = \frac{\beta L}{V_1}$  характеризует отношение потока реагентов между фазами и конвективного потока реагентов в плотной фазе ( $\beta$  — коэффициент межфазного обмена). Коэффициент  $q$  определяет долю газа, идущую в плотной фазе.

Краевые условия для задачи (1.44) выглядят следующим образом: при  $\xi=0$ .

$$\frac{dC_1}{d\xi} = Pe(C_1 - C_0),$$

$$C_2 = C_0, \quad (1.45)$$

при  $\xi=1$

$$\frac{dC_1}{d\xi} = 0.$$

На выходе из слоя потоки из каждой фазы смешиваются и общая концентрация  $C_k$  определяется выражением

$$C_k = qC_{1k} + (1 - q)C_{2k}. \quad (1.46)$$

Прежде чем перейти к методам решения указанных уравнений математического описания каталитических процессов, еще раз рассмотрим эти уравнения все вместе, чтобы можно было провести их классификацию с точки зрения решения на электронных вычислительных машинах.

## § 7. ОСНОВНЫЕ ВИДЫ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ

В табл. 1.1 приведены основные типы уравнений, которые приходится решать на ЭВМ при моделировании каталитических процессов. Как видно из таблицы, процессы в слоях катализатора описываются системами нелинейных (как правило) дифференциальных уравнений в обыкновенных и частных производных первого и второго порядка. Это уравнения диффузионные и теплопроводности с источником тепла и вещества. Коэффициенты уравнений могут быть как постоянными, так и переменными.

Среди этих уравнений можно выделить несколько групп, и в дальнейшем уравнения каждой группы будут рассматриваться отдельно. Первая группа уравнений — алгебраические (1). Вторая группа — обыкновенные дифференциальные уравнения первого порядка (2—4), причем среди них выделим две подгруппы — уравнения с начальными условиями (2), (3) и уравнения с краевыми условиями на разных границах слоя (4).

Уравнения (6)—(9) второго порядка, как увидим в дальнейшем, имеют общий метод решения. Поэтому они выделены во вторую группу. Четвертую группу составляют уравнения смешанного типа, к которым

относится математическое описание двухфазной модели псевдооживленного слоя (5).

И, наконец, последнюю группу составляют уравнения общего вида математического описания процесса в слое катализатора (10). В этой группе будут рассмотрены также уравнения общего вида с переменными коэффициентами (11).

В дальнейшем при ссылках на исходные уравнения следует обращаться к табл. 1.1.

## ЛИТЕРАТУРА К ГЛАВЕ I

1. Г. К. Боресков, М. Г. Слинько.—Хим. пром., № 3, 193 (1960).
2. М. Г. Слинько. Кинетика и катализ, 3, 481 (1962).
3. Г. К. Боресков, М. Г. Слинько. Хим. пром., № 1, 22 (1965).
4. Г. К. Боресков, М. Г. Слинько. ТОХТ, 1, 3 (1967).
5. P. Hugo.—Chem. Eng. Sci., 29, 187, 385, 975 (1965).
6. C. R. Wilke.—Chem. Eng. Progr., 46, 95 (1950).
7. В. С. Бесков, О. А. Малиновская.—Сб. «Пористая структура катализаторов и процессы переноса в гетерогенном катализе», вып. 6. Новосибирск, 1968.
8. М. Г. Слинько. Сб. «Научные основы приготовления катализаторов». Новосибирск, РИО СО АН СССР, 1964, стр. 68.
9. Т. И. Зеленьяк, В. С. Бесков, М. Г. Слинько. Кинетика и катализ, 7, 865 (1966).
10. Г. К. Боресков. «Катализ в производстве серной кислоты». Госхимиздат, 1954.
11. С. Я. Пшежецкий, А. Н. Рубинштейн.—ЖФХ, 20, 1127 (1946).
12. С. Я. Пшежецкий.—ЖФХ, 21, 1019 (1947).
13. Г. К. Боресков, М. Г. Слинько.—ЖФХ, 16, 235 (1952).
14. J. J. Carberry.—Chem. Eng. Sci., 17, 675 (1962).
15. E. A. Flood. The structure and properties of porous materials, London, 1958.
16. P. Schneider, P. Mitschke.—Coll. Czech. Chem. Comm. 30, 146 (1965).
17. J. J. Carberry.—A. I. Ch. E. Journal, 9, 460 (1962).
18. А. А. Иванов, Г. К. Боресков, В. С. Бесков.—Сб. «Пористая структура катализаторов и процессы в гетерогенном катализе», вып. 21, Новосибирск, 1968.
19. H. M. Hubbert.—Ind. Eng. Chem., 36, 1012 (1944).
20. М. Э. Аэров, Н. Н. Умник.—ЖТФ, 21, 1351, 1364 (1951).
21. P. V. Danckwerts.—Chem. Eng. Sci., 2, 1 (1953).
22. H. Kramers, G. Alberda.—Chem. Eng. Sci., 2, 173 (1953).
23. O. Levenspiel, W. K. Smith.—Chem. Eng. Sci., 6, 227 (1957).
24. R. Aris.—Chem. Eng., Sci., 10, 80 (1959); 11, 194 (1959).
25. T. R. Pearson.—Chem. Eng. Sci., 10, 281 (1959).
26. D. Carter, W. G. Bir.—Chem. Eng. Progr., 58, 40 (1962).
27. J. Beek.—"Advances in Chemical Engineering", Academic Press, v. 3, № 4, 1962, p. 203.
28. J. E. Crider, A. S. Foss.—A. I. Ch. E. Journal, 11, 1012 (1965).
29. H. S. Mickley, K. A. Smith, E. I. Korchak.—Chem. Eng. Sci., 20, 237 (1956).
30. В. С. Бесков.—Сб. «Моделирование и оптимизация каталитических процессов». «Наука», 1965, стр. 59.
31. H. A. Deans, L. Lapidus.—A. I. Ch. E. Journal, 6, 656 (1960).
32. J. Coste, D. Rudd, N. R. Amundson.—Canad. J. Chem. Eng., Aug. 159, (1961).
33. В. Г. Левич, В. С. Маркин, Ю. А. Чизмаджев.—ДАН СССР, 166, 1401 (1966).
34. С. И. Кучанов, Л. М. Письмен.—ТОХТ, 1, 116 (1967).
35. G. A. Turner.—Chem. Eng. Sci., 7, 156 (1958).
36. G. A. Turner.—Chem. Eng. Sci., 11, 125 (1962).
37. В. В. Дильман, М. Б. Айзенбуд, Э. З. Шульц.—Хим. пром., № 2, 123 (1966).
38. М. Э. Аэров.—Химия и технология топлив и масел, № 10, 9 (1962).
39. I. P. Vignes, P. J. Grambouze.—Chem. Eng. Sci., 17, 73 (1962).
40. J. Adler, R. Vortmyer.—Chem. Eng. Sci., 18, 99 (1963).
41. J. J. Carberry, —H. N. Wendel.—A. I. Ch. Journal, 9, 129 (1963).
42. В. С. Бесков, В. А. Кузин, М. Г. Слинько.—Хим. пром., № 7, 508 (1964).
43. В. С. Бесков, В. А. Кузин, М. Г. Слинько.—Хим. пром., № 1, 4 (1965).

44. Ю. Ш. Матрос, В. С. Бесков. — Хим. пром., № 12, 883 (1963).
  45. P. V. Dankwerts. — Chem. Eng. Progr., 2, 173 (1953).
  46. R. Aris, N. R. Amundson. — A. I. Ch. Journal, 3, 260 (1957).
  47. T. R. Pearson. — Chem. Eng. Sci., 10, 281 (1959).
  48. G. I. Taylor. — Proc. Roy. Soc., 233A, 446 (1954).
  49. L. Fang, I. K. Ahn. — Ind. Eng. Chem., Proc. design and develop., 1, 190 (1962).
  51. Ю. С. Кабанов, В. Б. Скоморохов, О. А. Малиновская, В. А. Мазо. — Сб. «Всесоюзная конференция по химическим реакторам», т. I. Новосибирск, СО АН СССР, 1965, стр. 54.
  52. C. Y. Shen, H. F. Johnstone. — A. I. Ch. E. Journal, 1, 349 (1955).
  53. W. G. May. — Chem. Eng. Progr., 55, 49 (1959).
  54. В. Ш. Кернерман, В. О. Мещеряков. — сб. «Моделирование и оптимизация каталитических процессов». «Наука», 1965, стр. 348.
  55. P. N. Rowe. — Chem. Eng. Progr., 60, 75 (1964).
-

### МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ НА АНАЛОГОВЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МАШИНАХ

#### § 1. АНАЛОГОВЫЕ И ЦИФРОВЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МАШИНЫ

Аналитическое решение уравнений математического описания химических процессов, как правило, получить нельзя. Использование математических описаний стало возможным с появлением вычислительных средств. Наибольшее распространение получили электронные аналоговые (АВМ) и цифровые (ЦВМ) вычислительные машины. Принципам их работы посвящено довольно много исследований (см., например, [1—4]), и здесь на них не будем останавливаться.

Можно привести сравнительные характеристики (табл. 2.1) аналоговых и цифровых машин [5], из которых видно, что для большинства химических процессов, даже включающих в себя краевые задачи и уравнения в частных производных, аналоговые машины могут служить весьма удобным и сравнительно дешевым инструментом исследования.

Рассмотрим виды уравнений, описывающих процессы в каталитических реакторах, для того чтобы, оценив их особенности, определить класс уравнений, наиболее пригодный для построения математических моделей реакторов и процессов на аналоговых машинах.

#### § 2. ВИДЫ УРАВНЕНИЙ, РЕШАЕМЫХ НА АВМ

Процессы, протекающие в слое катализатора, в самом общем виде описываются уравнениями в частных производных параболического типа в присутствии внутренних источников тепла и вещества. Однако в каждом частном случае вид уравнения может меняться, и очень широко, в результате чего для их решения необходимо применять различные методы, резко отличающиеся друг от друга. Определенный круг методов связан с применением аналоговых машин. Это не означает, конечно, что данные задачи не могут быть решены на цифровых машинах, однако, применяя аналоговые машины, можно добиться тех же результатов с меньшей затратой труда и времени.

#### Слой идеального вытеснения

Рассмотрим наиболее простой случай, а именно реакцию, происходящую в реакторе, где продольная и радиальная диффузии пренебрежимо малы (уравнения (3) из табл. 1.1). Именно для таких реакторов

Таблица 2.1

Аналоговая машина	Цифровая машина
<p>Моделирует поведение любой системы посредством взаимодействия легко обрабатываемых и измеряемых параметров</p> <p>Моделирование является непрерывным. Позволяет включать такие понятия, как скорость, состояние, ускорение</p>	<p>Производит арифметические действия над числами</p> <p>Оперирует дискретно. Может лишь аппроксимировать эффекты более высокого порядка</p>
<p>Результаты представляются как семейство кривых изменения зависимой переменной</p>	<p>Результаты представляются как таблицы чисел</p>
<p>Скорость решения задачи является прямой функцией скорости физической системы и не зависит от размера или сложности системы</p>	<p>Скорость решения является прямой функцией сложности и размера задачи и сравнительно не зависит от скорости процесса</p>
<p>Размер машины (число решающих блоков) определяет размер задачи, которая может быть решена. Упрощающие предположения часто ведут к уменьшению сложности</p>	<p>Объем задачи отражается на времени вычисления. Если позволяет время, то объем задачи неограничен</p>
<p>Конкретно предназначена для решения обыкновенных дифференциальных уравнений. В меньшей степени — для решения дифференциальных уравнений в частных производных, если их можно преобразовать в обыкновенные</p>	<p>Пригодна почти для всех типов задач. Сложные уравнения в частных производных поддаются решению в большей степени, чем на аналоговых машинах</p>
<p>Хорошо удовлетворяет моделированию кинетики химических реакций</p>	<p>Предпочтительнее при определении кинетических параметров, когда требуется обработка статистических данных</p>
<p>Удовлетворительна при изучении переходных режимов</p>	<p>Удовлетворительна при изучении стационарных процессов</p>

аналоговые машины являются наиболее удобным инструментом исследования. Уравнения такого реактора имеют вид (в безразмерной форме

$$\begin{aligned}\frac{dx}{d\tilde{\tau}} &= \omega(x, \theta), \\ \frac{d\theta}{d\tilde{\tau}} &= \Delta\theta_{ad_0} \omega_\theta(x, \theta) - B(0 - \theta_x).\end{aligned}\quad (2.1)$$

где

$$\theta = \frac{T - T_0}{RT_0^2/E}, \quad x = \frac{C_0 - C}{C_0}.$$

Решение этих уравнений всегда устойчиво, так как по каждой переменной они являются уравнениями первого порядка. Однако при их решении встречаются свои трудности, заключающиеся в основном в том, что правые части уравнений (кинетическая функция) могут иметь сложный вид, и тогда реализация их с помощью блоков машины сопряжена с большими погрешностями. Особенно это относится к обратным реакциям, когда вблизи равновесного состава реакционной смеси приходится вычислять разность двух близких по численному значению величин.

Рассмотрим, например, кинетические уравнения процессов синтеза аммиака и окисления  $\text{SO}_2$  в  $\text{SO}_3$ . Кинетические уравнения для окисления  $\text{SO}_2$  [6] будут:

$$\omega = kP \frac{b - \frac{ax}{2}}{1 - \frac{ax}{2}} \frac{1-x}{1-0,25x} \left[ 1 - \frac{1}{K_p^2} \left( \frac{x}{1-x} \right)^2 \frac{1 - \frac{ax}{2}}{b - \frac{ax}{2}} \right] \quad (2.2)$$

для синтеза аммиака [7]:

$$\omega = \frac{k}{\sqrt{P}} \frac{(1-z)^{2,5}}{z} \left[ L^2 - \frac{z^2}{(1-z)^4} \right],$$

$$L^2 = \frac{z_p^2}{(1-z_p)^4}, \quad (2.3)$$

где  $k$  — константа скорости реакции;

$a$  — начальная концентрация  $\text{SO}_2$ ;

$b$  — начальная концентрация  $\text{O}_2$ ;

$K_p$  — константа равновесия, зависящая от температуры;

$z$  — концентрация аммиака;

$z_p$  — равновесная концентрация аммиака;

$P$  — давление.

Как видно из уравнений (2.2) и (2.3), вблизи равновесия разности в квадратных скобках близки к нулю, а так как вычитаются довольно большие и сложные по виду выражения, то относительная ошибка разности будет резко возрастать при приближении значения скобки к нулю. Нужно отметить, что как раз эта область наиболее интересна для исследований. Кроме того, некоторые процессы обладают очень большой параметрической чувствительностью, что также ведет к возрастанию погрешностей, особенно относительно температуры в зоне реакции.

Определив, однако, тем или иным способом погрешности в решении заданного уравнения, можно в дальнейшем, если они не превышают допустимых пределов, моделировать процесс с большой эффективностью.

Уравнения (2.1) с условиями, заданными на одном конце (при  $\xi=0$ ), справедливы для реакторов с внешним теплоносителем или, при  $B=0$ , для адиабатического слоя. Но в практике встречаются реакторы с внутренним теплообменом, где газ, поступающий в слой катализатора, подогревается за счет тепла, выделяющегося в результате реакции (уравнения (4) из табл. 1.1). В таком случае приходится решать краевую задачу, например, вида

$$\frac{dx}{d\xi} = \omega(x, \theta),$$

$$\frac{d\theta}{d\xi} = \Delta\theta_{ад} \omega(x, \theta) - B(\theta - \theta_x), \quad (2.4)$$

$$-\frac{d\theta_x}{d\xi} = B(\theta - \theta_x)$$

с краевыми условиями: при  $\xi=0$   $x=x_0$ ,  $\theta=\theta_x$ ; при  $\xi=1$   $\theta_x=T_0$ .

Подобная задача решалась для реакции синтеза аммиака [8, 9]. Метод решения (2.4) является обычным для краевых задач методом проб и ошибок. Ищется такое значение входной температуры  $\theta|_{\xi=0}$ ,

при которой температура газа  $\theta$ , входящего в слой катализатора, и температура выходящего из холодильника газа  $\theta_x$  равны. Этот метод в применении к уравнению (2.4) позволяет находить стационарные решения, как устойчивые, так и неустойчивые. Неустойчивость режима возникает тогда, когда изменения концентрации реагирующих веществ или температурного режима вызывают настолько значительные тепло-выделения, что они не могут быть компенсированы изменением тепло-отвода [10, 11]. Анализ устойчивости сводится к анализу устойчивости решений уравнений, описывающих динамику реактора. Поэтому на машине, решающей стационарные уравнения, возможно получать и неустойчивые решения, хотя анализ их устойчивости при этом не производится.

Кроме таких уравнений, описывающих процессы, происходящие в различного типа реакторах, в каталитических исследованиях могут встречаться уравнения иных типов, для решения которых аналоговые машины также весьма удобны. Такими, в частности, являются задачи исследования кинетики и механизма сложных многостадийных каталитических реакций. Эти уравнения также представляют собой начальные задачи, но отличаются высоким порядком и, что самое главное, большим количеством неизвестных параметров, требующих определения в процессе решения. Подобная задача будет разобрана ниже.

### Поперечный перенос вещества и тепла. Неполное смешение

Радиальное распределение концентраций и температуры рассматривается в связи с определением того, при каких температурах, концентрациях и радиусе трубок может возникнуть перегрев по оси слоя. Математическое описание этого процесса было приведено в табл. 1.1 (уравнение (7)). Подобный тип уравнений будет разобран в дальнейшем. Здесь отметим только, что решать их с помощью существующих аналоговых машин весьма затруднительно. Разработаны удовлетворительные методы численного решения этих уравнений на цифровых вычислительных машинах (см. гл. III).

Если условия процесса таковы, что не происходит перегрева по оси цилиндрического слоя катализатора, то распределение температуры и концентраций в слое с достаточной точностью можно принять не зависящим от радиуса и рассматривать влияние на процесс лишь продольного переноса тепла и вещества [12]. Уравнение для таких процессов является обыкновенным уравнением второго порядка с краевыми условиями:

$$\frac{1}{Pe_D} \frac{d^2 x}{d\xi^2} - \frac{dx}{d\xi} + \omega(x, \theta) = 0, \quad (2.5)$$

$$\frac{1}{Pe_T} \frac{d^2 \theta}{d\xi^2} - \frac{d\theta}{d\xi} + \Delta\theta_{ad_0} \omega(x, \theta) - B(\theta - \theta_x) = 0,$$

$$\text{при } \xi = 0 \quad \frac{dx}{d\xi} = Pe_D x; \quad \frac{d\theta}{d\xi} = Pe_T \theta; \quad \text{при } \xi = 1 \quad \frac{dx}{d\xi} = \frac{d\theta}{d\xi} = 0.$$

Эти уравнения описывают довольно широкий класс процессов, к которым относятся процессы, протекающие в коротких неподвижных слоях катализатора или слоях с очень малыми скоростями газов, в реакторах с псевдоожиженным слоем катализатора. К тому же классу относятся уравнения, описывающие явления, происходящие на пори-

стом зерне катализатора [13]. В каждом из названных случаев математическое описание имеет свои особенности, а следовательно, несколько отличные друг от друга способы решения.

Далее все эти типы математических описаний будут рассмотрены подробнее, а сейчас рассмотрим с точки зрения возможности решения на аналоговых машинах уравнения (2.5).

На первый взгляд его решение не должно вызывать затруднений, так как это уравнение в обыкновенных производных и, следовательно, к нему должны быть применимы обычные методы решения. Однако нужно учесть, что эта задача является краевой, а на аналоговой машине можно решать ее в виде задачи с начальными условиями. Обычно такое положение не вызывает особых затруднений, ибо, как правило, можно подобрать условия в начале интервала интегрирования такими, что условия в конце его будут выполнены. Такой метод решения краевых задач, называемый методом проб и ошибок, наиболее распространен при решении краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Указывается, например, что методом проб и ошибок можно решить любую краевую задачу, и проблема сводится лишь к наиболее рациональному поиску начальных условий [14]. Оказывается, уравнение вида (2.5), т. е. одномерное диффузионное уравнение с потоком или без потока газа вдоль оси, с линейным или нелинейным внутренним источником, решать методом проб и ошибок (поиска начальных условий), за исключением немногочисленных случаев, нельзя, так как решение подобных уравнений, представленных как уравнения с начальными условиями, становится неустойчивым.

Покажем это, пользуясь асимптотическими методами исследования нелинейных уравнений [15]. Для примера рассмотрим второе уравнение в системе (2.5).

$$\frac{1}{\text{Pe}_T} \frac{d^2 \theta}{d\xi^2} - \frac{d\theta}{d\xi} + \Delta \theta_{\text{ад}} f(\theta) W(x) - B(\theta - \theta_x) = 0. \quad (2.6)$$

Здесь  $f(\theta)$  — экспоненциальная функция от  $\theta$ , а  $W(x)$  можно заменить на  $W_1(\xi)$ , причем известно, что при  $\xi \rightarrow \infty$   $W_1(\xi) \rightarrow 0$ . Запишем (2.6) в виде

$$\begin{aligned} \frac{d\theta}{d\xi} &= y, \\ \frac{dy}{d\xi} &= \text{Pe } y - \text{Pe } \Delta \theta_{\text{ад}} f(\theta) W_1(\xi) + \text{Pe } B(\theta - \theta_x) \end{aligned} \quad (2.7)$$

и исследуем характер особой точки этого уравнения. Положение особой точки определяется из уравнения

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{y}{\text{Pe } y - \text{Pe } \Delta \theta_{\text{ад}} f(\theta) W_1(\xi) + \text{Pe } B(\theta - \theta_x)}$$

или, обозначив числитель через  $P(\theta, y)$ , а знаменатель через  $Q(\theta, y)$ , получим

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{P(\theta, y)}{Q(\theta, y)}. \quad (2.8)$$

Особая точка имеет место, когда  $P(\theta, y) = 0$  и  $Q(\theta, y) = 0$ . Определить ее положение можно, не решая уравнения  $Q(\theta, y) = 0$ , поскольку  $Q(\theta, y)$  есть выражение для второй, а  $P(\theta, y)$  — для первой производной  $\theta(\xi)$ . Из физических соображений следует, что одновременно первая и вторая производные этой функции могут быть равны нулю лишь на бесконечности, так как  $\theta$  — температура в реакторе. Но температура может



стать постоянной только при полном завершении реакции, что происходит, строго говоря, при  $\xi \rightarrow \infty$ . При этом  $\theta$  будет равна  $\theta_x$ . В окрестности особой точки можно записать уравнения в вариациях, приняв  $\theta = \theta_x$  и  $y=0$  за начало координат (подробнее см. [15]):

$$\frac{d\theta}{d\xi} = ay + b\theta + P_2(\theta, y),$$

$$\frac{dy}{d\xi} = cy + d\theta + Q_2(\theta, y), \quad (2.9)$$

где

$$a = P'_y(\theta_x, 0) = 1; \quad b = P'_\theta(\theta_x, 0) = 0,$$

$$c = Q'_y(\theta_x, 0) = \text{Pe}; \quad d = Q'_\theta(\theta_x, 0) = \text{Pe}B,$$

$P_2(\theta, y)$ ,  $Q_2(\theta, y)$  — функции, обладающие непрерывными частными производными до второго порядка включительно и обращающиеся в начале координат в нуль вместе со своими частными производными первого порядка.

Пренебрегая членами высших порядков, получим

$$\frac{d\theta}{d\xi} = y, \quad (2.10)$$

$$\frac{dy}{d\xi} = \text{Pe}y + \text{Pe}B\theta.$$

Характеристическое уравнение системы (2.10):

$$\lambda^2 - \text{Pe}\lambda - \text{Pe}B = 0,$$

а его корни

$$\lambda_{1,2} = \frac{\text{Pe}}{2} \left( 1 \pm \sqrt{1 + \frac{4B}{\text{Pe}}} \right),$$

откуда видно, что корень  $\lambda_1$  всегда положителен, что и означает неустойчивость положения равновесия. Таким образом, это доказательство, а также проведенное пробное решение на машине показывают, что уравнения подобные (2.5), можно решать только методом конечных разностей. Пользуясь этим методом, можно получить систему алгебраических уравнений в общем случае нелинейных, решить которую уже возможно, хотя здесь возникают свои собственные трудности. Пока не будем касаться количества шагов, на которое необходимо разбить интервал интегрирования. Примем просто, что объем машины достаточен для решения полученной системы. Решение этой системы должно быть устойчиво, так как здесь выполняются одновременно оба краевых условия. Тем не менее ее решение на машине вновь обнаруживает неустойчивость. Такая ситуация складывается в результате того, что схема, составленная только на суммирующих и других безинерционных звеньях, подвержена воздействию малых возмущений [1]. В самом деле, небольшое отклонение переменных от значений, удовлетворяющих системе уравнений, приводит к сильному изменению выходных величин, которые, влияя, в свою очередь, на входы других сумматоров, выводят последние из режима нормальной работы. В этом случае, однако, можно использовать известный метод преобразования системы алгебраических уравнений в систему дифференциальных уравнений, установившееся решение которой является решением первоначальной алгебраической системы. В конечном итоге получается, что на машине решается методом прямых нестационарное диффузионное уравнение. Метод прямых в применении к аналоговым машинам сравнительно подробно описан в работе [2].

Все сказанное относительно уравнения (2.5) можно отнести и к уравнению с радиальным переносом с той только разницей, что вместо производной по времени здесь входит производная по длине.

Остается неразобраным вопрос о количестве шагов, который, собственно, становится теперь решающим при рассмотрении возможности решения на аналоговой машине диффузионных уравнений. Однако его нужно решать в каждом случае отдельно, поэтому оценка количества шагов будет произведена ниже, на конкретном примере. Здесь скажем только, что такой тип уравнений решается на аналоговой машине с наибольшими трудностями и нередко вообще не поддается решению.

### § 3. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ С НАЧАЛЬНЫМИ УСЛОВИЯМИ

(случаи идеального вытеснения и кинетические модели)

#### Принципы масштабирования (подготовка задачи к решению)

Кратко остановимся на принципах масштабирования. Физические величины, входящие в уравнения и подлежащие решению, имеют различную физическую природу и изменяются в различных пределах. В аналоговой машине все они представляются в виде напряжений, изменяющихся в строго определенных пределах, чаще всего в пределах  $\pm 100$  в. Поэтому в уравнения необходимо ввести масштабные множители и, исходя из величины коэффициентов, входящих в уравнения, и рассчитанных масштабных множителей, вычислить коэффициенты передач решающих блоков.

В различных руководствах [1, 3] рекомендации по методике выбора масштабных коэффициентов изложены в самом общем виде и иногда довольно трудно переносятся на конкретную задачу. Так, в [1] указывается, что общих рецептов для выбора масштабных множителей дать нельзя. Однако в большинстве случаев можно пользоваться достаточно общим методом, если принять, что физические переменные меняются в известных пределах и что пределы изменения машинных переменных должны быть  $\pm 100$  в. Кроме того, необходимо ограничивать по величине коэффициенты передачи отдельных решающих усилителей. Такие ограничения могут быть [3]: для усилителей с триодной схемой компенсации дрейфа нуля (например, для машины МН-7) в режиме интегрирования  $5 \div 10$ , в режиме масштабного блока — 20; для усилителей с автоматической компенсацией дрейфа (типа МН-14) они увеличиваются до 20 в первом случае и до 100 во втором. Принимая во внимание изложенные выше соображения, можно сказать, что очень удобен следующий способ масштабирования [4]: масштаб любой переменной определяется как

$$\frac{N_{\text{маш.макс}}}{N_{\text{физ.макс}}} = m_N,$$

где  $N_{\text{маш}}$  — переменная в машинном представлении;

$N_{\text{физ}}$  — физическая величина.

Так как  $N_{\text{маш.макс}}$  всегда (для большинства типов машин) равна 100 в, то

$$m_N = \frac{100}{N_{\text{физ.макс}}}. \quad (2.11)$$

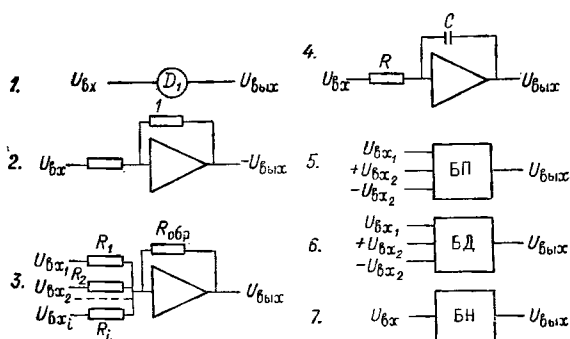


Рис. 2.1. Обозначения решающих элементов аналоговых вычислительных машин.

1 — потенциометры, постоянные коэффициенты  $U_{\text{вых}} = a U_{\text{вх}} (a < 1)$ ;

2 — инвертор  $U_{\text{вых}} = -U_{\text{вх}}$ ;

3 — сумматор  $U_{\text{вых}} = -R_{\text{обр}} \sum_i \frac{1}{R_i} U_{\text{вх}i}$ ;

4 — интегратор  $U_{\text{вых}} = -\frac{1}{RC} \int_0^t U_{\text{вх}}(t) dt$ ;

5 — блок произведения  $U_{\text{вых}} = 0,01 U_{\text{вх}1} U_{\text{вх}2}$ ;

6 — блок деления  $U_{\text{вых}} = 10 \frac{U_{\text{вх}1}}{U_{\text{вх}2}}$ ;

7 — блок универсальной нелинейности  $U_{\text{вых}} = f(U_{\text{вх}})$ .

и сумматора  $\frac{R_{\text{обр}}}{R_{\text{вх}}}$  (по каждому входу). Может случиться, однако, что коэффициенты передачи интеграторов окажутся слишком большими (см. ранее сказанное по этому поводу). Тогда, изменяя желательным образом масштаб независимой переменной  $m_N$ , можно изменить величину коэффициентов в нужную сторону. Надо сказать, что наиболее благоприятный случай будет тогда, когда коэффициенты машинного уравнения равны друг другу по порядку величины; в физически правильно поставленных задач чаще всего именно так и бывает. Допустимая разница в коэффициентах не должна превышать двух, в крайнем случае, трех порядков. В противном случае члены с относительно малыми коэффициентами будут вносить в решение вклад, сравнимый с погрешностью, вносимой решающими блоками, и, следовательно, не будут иметь никакой ценности.

**Нелинейности.** Типичными нелинейностями, встречающимися при моделировании химических процессов, являются экспоненциальные зависимости типа  $e^{-E/RT}$ , где  $T$  — искомая функция (температура). Нелинейности в аналоговых машинах строятся методом кусочнолинейной аппроксимации, т. е. приближенное выражение для функции имеет вид:

$$y(x) = y_0 + a_0 x + \sum_{i=1}^n b_i (x - x_{i\text{нач}}),$$

$$\text{где } b_i = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq x_{i\text{нач}}, \\ B_i & \text{при } x > x_{i\text{нач}}, \end{cases}$$

$x_{i\text{нач}}$  — значения  $x$  в начале каждого отрезка разбиения аргумента. Ясно, что при увеличении  $n$ , т. е. числа отрезков, точность аппроксимации будет возрастать. У современных аналоговых машин количество этих отрезков не превышает 10—20.

С помощью такого метода вычисления масштабов добиваются максимального использования машинной шкалы, т. е. минимальной относительной погрешности.

Масштабные преобразования производятся как с самими переменными, так и с функциями, зависящими от них, причем масштаб функции выбирается также по формуле (2.11), в результате чего функция  $f(N)$  вписывается в квадрат со сторонами, равными 100 в.

Подставив численные значения масштабов и исходных коэффициентов, получим значения коэффициентов передачи для блоков, выполняющих суммирование и интегрирование. Напомним, что коэффициент передачи интегратора равен  $\frac{1}{R_{\text{вх}} C}$ .

Значительным ограничением в построении нелинейности является ограничение по максимальной крутизне аппроксимируемой функции: в случае экспоненты это означает ограничение по интервалу температур в зоне реакции. Если принять, что крутизна функций не должна превышать 5—7, то при обычно встречающихся энергиях активации, а именно 1000—20 000, интервал температур не должен быть больше 100—200°. Такие значения интервалов обычно бывают удовлетворительными, поскольку рабочий температурный интервал из-за термических свойств катализатора имеет тот же порядок.

Возвращаясь к количеству прямолинейных участков, на которое можно разбить аппроксимируемую функцию, следует сказать, что того количества их, которое имеется в аналоговых машинах (например, 10 — у МН-7 и 20 — у МН-14), достаточно, чтобы построить функцию со значительной кривизной с точностью 1—2%. Что касается экспоненциальных зависимостей рассматриваемого типа, то здесь можно обойтись даже меньшим количеством отрезков, сохранив необходимую точность. При построении нелинейности нужно задаваться точностью не более 1—2%, исходя из того, что другие нелинейности типа произведения и частного реализуются в машине не с большей точностью.

Аппроксимация нелинейности может производиться как аналитически, так и графически. Аналитические методы позволяют определить способ разбиения оси абсцисс на отрезки так, что функция аппроксимируется с заданной точностью. Однако практически достаточную точность можно получить и с помощью графического построения [3].

**Блок-схема уравнений.** Обозначения, принятые в блок-схемах встречающихся здесь задач для решающих элементов, приведены на рис. 2.1.

### Пример масштабирования и решение уравнений, описывающих НАК-процесс

Описываемая далее методика моделирования НАК-процесса окислительным аммонолизом пропилена служит примером моделирования на аналоговых машинах сложных процессов. Этот же пример выбран в качестве демонстрации методов подготовки исходных уравнений к решению на аналоговой машине.

Исходная система уравнений, описывающая процесс синтеза НАКа, имеет вид [21, 22]:

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{d\tau} &= -\frac{22,4}{C_{01}} W_1(x_1, \dots, x_6, T), \\ \frac{dx_2}{d\tau} &= \frac{22,4}{C_{01}} W_2(x_1, \dots, x_6, T), \\ \frac{dx_3}{d\tau} &= -\frac{22,4}{C_{03}} W_3(x_1, \dots, x_6, T), \\ \frac{dx_4}{d\tau} &= \frac{22,4}{C_{01}} W_4(x_1, \dots, x_6, T), \\ \frac{dx_5}{d\tau} &= \frac{22,4}{C_{01}} W_5(x_1, \dots, x_6, T), \\ \frac{dx_6}{d\tau} &= -\frac{22,4}{C_{06}} W_6(x_1, \dots, x_6, T).\end{aligned}\tag{2.12}$$

Для процесса с теплоотводом эта система дополняется уравнением теплового баланса

$$\frac{dT}{d\tau} = \frac{22,4}{c_p} \sum_j Q_j r_j (x_1, \dots, x_6, T) - B(T - T_x),$$

- где  $x_1$  — доля непрореагировавшего пропилена;  
 $x_2, x_4, x_5$  — степень превращения пропилена в акролеин, НАК и ацетонитрил соответственно;  
 $x_3, x_6$  — доля непрореагировавшего аммиака и кислорода;  
 $C_{01}, C_{03}, C_{06}$  — начальная объемная концентрация пропилена, аммиака и кислорода;  
 $\tau = \frac{v_k}{V_0}$  — условное время контакта;  
 $v_k$  — объем катализатора;  
 $V_0$  — объем реакционной смеси при нормальных условиях;  
 $c_p$  — объемная теплоемкость реакционной смеси;  
 $Q_j$  — тепловой эффект  $j$ -ой реакции;  
 $T_x$  — температура холодильника;  
 $B = \frac{4\alpha}{c_p D}$  — параметр теплопередачи;  
 $D$  — диаметр реакционной трубки с катализатором;  
 $\alpha$  — коэффициент теплопередачи.

Парциальные давления компонентов в смеси определяются соотношениями

$$P_i = PC_0 x_i,$$

где  $P$  — общее давление;  $C_0 = C_{01}$  для  $i=1, 2, 4, 5$ ;  $C_0 = C_{03}$  для  $i=3$  и  $C_0 = C_{06}$  для  $i=6$ .

Моделирование на аналоговой машине процесса синтеза НАКа — весьма сложная задача. Основная трудность заключается в получении (образовании на нелинейных блоках машины) величин скоростей реакции. Однако, несмотря на эти трудности, суть которых станет ясной при подробном рассмотрении методики решения этой задачи, точность решения остается вполне удовлетворительной.

При сравнении результатов решения одного из вариантов, полученных на цифровой и аналоговой машинах, выяснилось, что расхождение в величинах степеней превращения основных продуктов реакции, кроме  $x_6$  (кислорода), не превышает 2—3% относительно их максимального значения. Решение с такой погрешностью может обеспечить получение практически важных результатов, проведение оптимизации процесса и т. д. Большая погрешность в вычислении  $x_6$  (до 10—15%) объясняется тем, что кислород в процессе участвует во всех реакциях и в уравнение, описывающее изменение его концентрации, входят следовательно, скорости всех реакций. В результате погрешность вычисления первой части уравнения, являющейся суммой погрешностей отдельных слагаемых, соответственно становится наибольшей.

### Масштабирование задачи

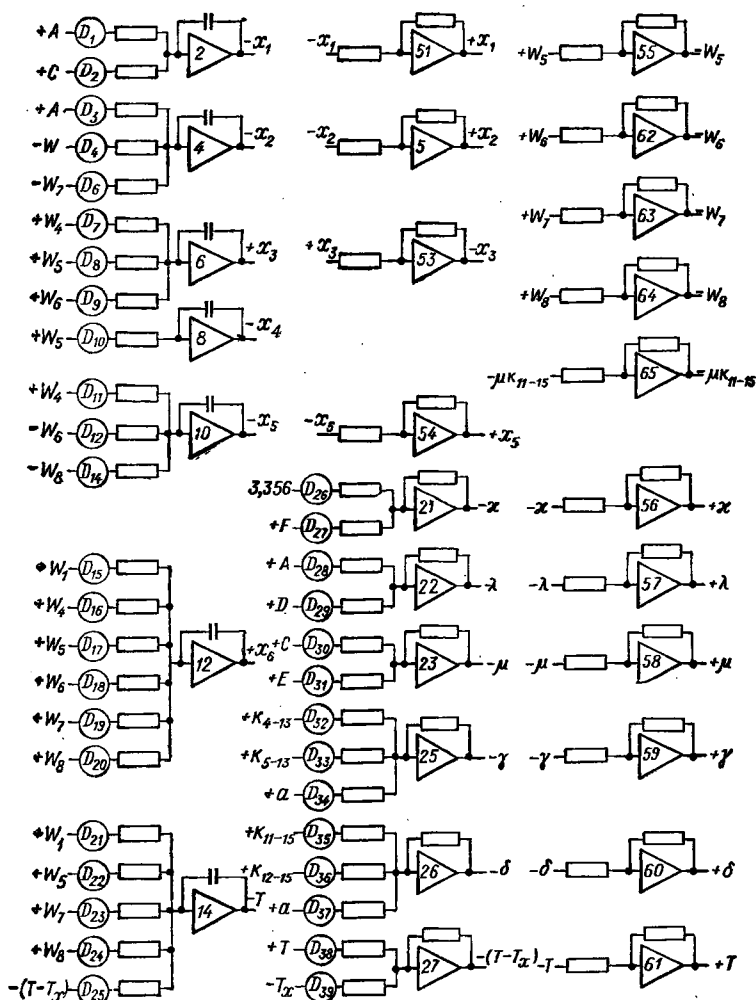
Рассмотрим теперь методику масштабирования, набора и решения процесса синтеза НАКа. Масштабирование вначале производится обычным образом, т. е. вычислением масштабов всех переменных по их максимальной величине. В табл. 2.2 приведены значения констант скоростей, рассчитанных в интервале температур 700—800° К. Там же даны

Таблица 2.2

$T^{\circ}\text{K}$	$\kappa_1 \cdot 10^{-3}$	$\kappa_8 \cdot 10^{-2}$	$\kappa_6 \cdot 10^{-3}$	$\kappa_{10-14} \cdot 10^{-1}$	$\kappa_4-13$	$\kappa_4$	$\kappa_{12-15} \cdot 10^1$	$\kappa_5-13$	$\kappa_{11-15}$	$\kappa_{18-19} \cdot 10^3$	$\kappa_{19} \cdot 10^{-1}$
700	2,05	0,173	0,540	0,182	1,155	0,266	0,240	0,129	0,571	0,601	0,439
710	2,45	0,204	0,609	0,185	1,145	0,297	0,242	0,138	0,550	0,665	0,500
720	2,88	0,244	0,715	0,187	1,135	0,331	0,247	0,147	0,589	0,699	0,570
730	3,41	0,295	0,814	0,189	1,128	0,367	0,250	0,156	0,626	0,727	0,682
740	4,13	0,346	0,936	0,193	1,109	0,405	0,252	0,166	0,664	0,765	0,724
750	4,80	0,402	1,056	0,195	1,093	0,447	0,257	0,176	0,706	0,796	0,816
760	5,57	0,482	1,203	0,197	1,077	0,497	0,260	0,186	0,749	0,829	0,920
770	6,47	0,552	1,356	0,199	1,068	0,536	0,263	0,197	0,788	0,863	1,027
780	7,56	0,650	1,545	0,201	1,060	0,586	0,268	0,207	0,828	0,898	1,194
790	8,74	0,748	1,724	0,205	1,053	0,641	0,271	0,219	0,879	0,934	1,332
800	10,15	0,878	1,925	0,207	1,042	0,703	0,273	0,228	0,915	0,962	1,401
Масштаб $m$	$9,85 \cdot 10^3$	$11,4 \cdot 10^3$	$5,22 \cdot 10^4$	$4,82 \cdot 10^3$	$0,0865 \cdot 10^3$	$0,142 \cdot 10^3$	$0,366 \cdot 10^3$	$0,438 \cdot 10^3$	$0,109 \cdot 10^3$	1,04	$0,714 \cdot 10^3$

Значения температур и констант скоростей (в вольтах)

0	20,2	19,7	28,2	87,7	100,0	37,8	84,6	56,6	55,9	62,5	31,2
10	24,2	23,3	31,8	89,2	99,1	42,2	85,5	60,5	60,1	69,2	35,7
20	28,4	27,8	37,3	90,2	98,1	47,2	87,2	64,5	64,3	72,7	40,7
30	33,7	33,6	42,5	91,1	97,6	52,4	88,2	68,4	68,4	75,6	45,7
40	40,6	39,4	48,8	93,0	96,0	57,6	89,0	72,8	72,5	79,5	51,7
50	47,2	45,8	55,1	94,0	94,6	63,7	90,8	77,2	77,1	82,8	58,2
60	54,9	54,8	62,7	95,0	93,2	70,8	91,2	81,6	81,8	86,2	65,7
70	63,8	63,1	70,8	95,9	92,4	76,3	92,7	86,4	86,0	89,7	73,3
80	74,4	74,1	80,6	97,0	91,7	83,5	94,6	90,8	90,4	93,4	85,2
90	86,1	85,2	89,8	99,0	91,5	91,2	95,5	96,0	96,0	97,1	95,1
100	100,0	100,0	100,0	100,0	91,2	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0



их масштабы и машинные величины. Крутизна нелинейности (рис. 2.2) очень мала, и в этом отношении никаких трудностей не возникает.

Запишем выражения для скоростей реакции, входящие в уравнения (2.12):

$W_1 = r_1 + r_2$ ,  $W_2 = r_1 + r_5 + r_7$ ,  $W_3 = r_4 + r_5 + r_6$ ,  $W_4 = r_5$ ,  
 $W_5 = r_3 + r_4 - r_6 - r_8$ ,  $W_6 = r_1 + 4,5r_2 + 2r_3 + 1,5r_4 + 0,5r_5 + 0,5r_6 + 3,5r_7 + 2,5r_8$ ,  
 где  $r_i$ , в свою очередь, равны:

$$\begin{aligned}
 r_1 &= k_1 P_1, \\
 r_2 &= \frac{k_6 k_{8-7}}{1 + k_{8-7}} P_1, \\
 r_3 &= \frac{k_8 P_1}{1 + k_{8-7}} \cdot \frac{k_{10-14}}{a + k_{10-14}}, \\
 r_4 &= \frac{k_8 P_1}{1 + k_{8-7}} \cdot \frac{a}{a + k_{10-14}}, \\
 r_5 &= \frac{(k_1 P_1 + k_{-4} P_2) a}{k_{4-13} + k_{5-13} + a}, \\
 r_6 &= \frac{\left( \frac{k_6 P_1}{1 + k_{8-7}} + k_{-12} P_5 \right)}{k_{11-15} + k_{12-15} + a}, \\
 r_7 &= \frac{k_{5-13} (k_1 P_1 + k_{-4} P_2)}{k_{4-13} + k_{5-13} + a}, \\
 r_8 &= \frac{k_{11-15} \left( \frac{k_6 P_1}{1 + k_{8-7}} + k_{-12} P_5 \right)}{k_{11-15} + k_{12-15} + a}, \\
 a &= \frac{k_{18-19} P_3}{1 - k_{18-19} P_3}.
 \end{aligned}$$

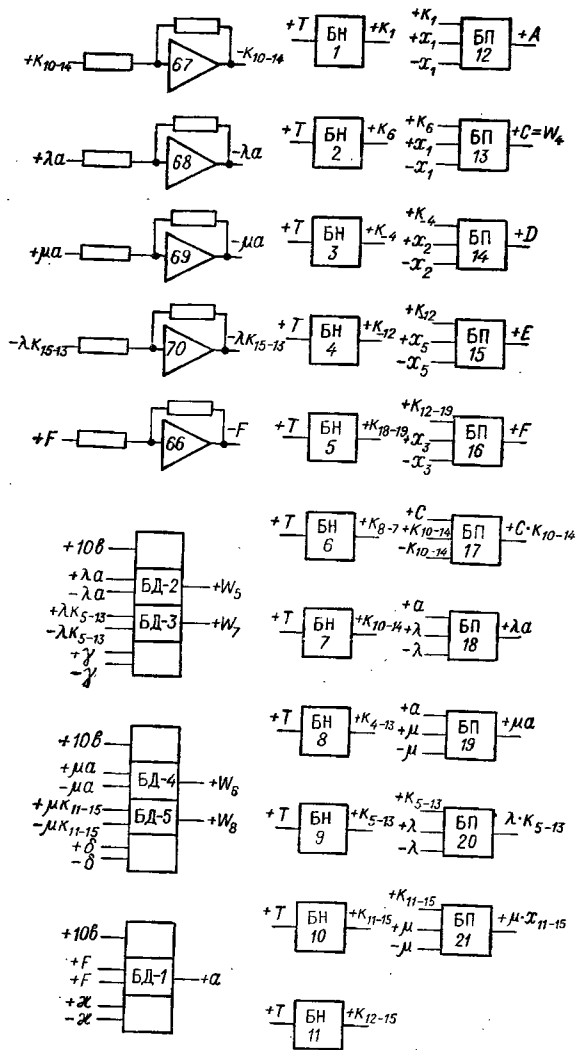


Рис. 2.2. Блок-схема модели процесса синтеза НАКа.

Из приведенных выражений видно, что для образования в машине каждой из этих скоростей необходимо применить несколько блоков умножения и деления и нелинейностей, что, учитывая их сравнительно большую погрешность и масштабные особенности, приводит к основной трудности в моделировании этого процесса на аналоговой машине.

Перейдем к масштабированию выражений для скоростей, введя некоторые обозначения для сокращения записи:

$$\begin{aligned}
 k_1 x_1 &= A, \quad 1 + k_{8-7} = \alpha, \quad k_8 x_1 = C, \quad a + k_{10-14} = \beta, \quad k_{-4} x_2 = D, \\
 k_{4-13} + k_{5-13} + a &= \gamma, \quad k_{-12} x_5 = E, \quad k_{11-15} + k_{12-15} + a = \delta, \\
 k_{18-19} x_3 &= F, \quad 1 + k_{18-19} P_3 = \kappa, \quad k_1 P_1 + k_{-4} P_2 = \lambda, \\
 \frac{k_8 P_1}{1 + k_{8-7}} + k_{-12} P_5 &= \mu.
 \end{aligned}$$

Исходя из масштабов констант скоростей и масштабов переменных, равных  $m_{x_1} = 100$ ;  $m_{x_2} = 500$ ;  $m_{x_3} = 100$ ;  $m_{x_4} = 100$ ;  $m_{x_5} = 200$ ,



вычисляем масштабы остальных переменных:

$$\begin{aligned}m_A &= m_{k_1} \cdot m_{x_1} \cdot 10^{-2} = 0,985 \cdot 10^4, \\m_C &= m_{x_6} \cdot m_{x_1} \cdot 10^{-2} = 0,522 \cdot 10^5, \\m_D &= 0,710 \cdot 10^3, \\m_E &= 0,163 \cdot 10^4, \\m_F &= 0,104 \cdot 10.\end{aligned}$$

Относительно величины  $\alpha$  максимальное значение  $K_{8-7}$  равно  $0,88 \cdot 10^{-2}$ . Пренебрегая этой величиной, получим ошибку менее 1%, что, учитывая погрешности остальных элементов машины, не скажется на точности решения. Таким образом,  $\alpha$  можно принять равной 1.

Обозначим машинные переменные буквами с чертой. Тогда

$$\frac{\bar{x}}{m_x} = 1 + PC_{03} \frac{\bar{F}}{m_F}. \quad (2.13)$$

Из этого выражения можно вычислить  $m_x$ , если принять, что при достижении максимума  $\bar{x}$ , т. е. 100 в,  $\bar{F}$  также равна 100 в. Тогда

$$m_x = \frac{\bar{x}_{\max} m_F}{m_F + C_{03} P \bar{F}_{\max}} = \frac{100 \cdot 1,04}{1,04 + 0,3 \cdot 100} = 3,35$$

и, следовательно, машинная переменная

$$\bar{x} = 3,35 + 0,967 \bar{F}.$$

Далее

$$m_a = \frac{m_F}{m_x} \cdot 10 = 3,1.$$

Подобно (2.13) вычисляем:

$$m_\beta = 3,1 \text{ и } \bar{\beta} = \bar{a} + 0,64 \cdot 10^{-3} \cdot k_{10-14}. \quad (2.14)$$

Здесь очевидно, что, как и в  $\alpha$ , сомножителем с  $k_{10-14}$  нужно пренебречь, так как даже при желании коэффициент перед  $k_{10-14}$  на машине установить не удастся из-за его маленькой величины.

При  $m_\gamma = 9,1$

$$\gamma = 0,1 \bar{k}_{4-13} + 0,021 \cdot \bar{k}_{5-13} + 0,88 \bar{a}.$$

К вычислению масштаба  $\gamma$  мы подошли формально, используя выражение (2.13). Такой способ верен, если все переменные (их машинные значения) достигают в максимуме 100 в. Однако в данном случае это не так. Машинная переменная

$$\bar{a} = \frac{\bar{F}}{3,35 + 0,967 \bar{F}} \cdot 10 \quad (2.15)$$

(множитель 10 появляется в результате деления на блоке деления машины). Из (2.15) видно, что  $\bar{a}$  не может быть больше 10 в. Учитывая хорошую точность масштабных усилителей машины, выгодно увеличить  $\bar{a}$  в 10 раз с тем, чтобы остальные операции, в которых участвует  $\bar{a}$ , производились с возможно большими напряжениями. В этом случае масштаб  $\bar{a}$  возрастает до 31, и масштаб  $\gamma$ , а следовательно, и выражение для  $\gamma$  будут иметь вид:

$$\begin{aligned}m_\gamma &= 42,6, \\ \bar{\gamma} &= 0,49 \bar{k}_{4-13} - 0,097 \bar{k}_{5-13} + 0,14 \bar{a}.\end{aligned} \quad (2.16)$$

Из (2.16) видно, что  $\gamma$  значительно возрастает, а относительная ошибка уменьшается. Кстати, изменение  $\bar{a}$  в выражении (2.14) ничего не изменит, так как тогда на порядок увеличится коэффициент при  $k_{10-14}$ , но это не сделает его достаточно большим, чтобы можно было настроить его на машине. Масштаб  $\beta$  станет также равным 31.

Вычисляя подобным образом масштабы остальных переменных, получим:

$$\begin{aligned}m_{\delta} &= 21,7, \\ \bar{\delta} &= 0,199 k_{11-15} + 0,59 k_{12-15} + 0,21 \bar{a}, \\ m_{\lambda} &= 0,673 \cdot 10^3, \\ \bar{\lambda} &= 0,067 \bar{A} + 0,933 \bar{D}, \\ m_{\mu} &= 0,139 \cdot 10^4, \\ \bar{\mu} &= 0,027 \bar{C} + 0,973 \bar{E}.\end{aligned}$$

Далее рассчитываем масштабы скоростей реакций, причем для удобства перестройки коэффициентов в процессе решения постоянные множители  $P$  и  $C_0$  выносим везде, где они входят в качестве общих множителей. Итак,

$$\begin{aligned}m_{r_1} &= m_A = 0,985 \cdot 10^4, \\ m_{r_2} &= m_C m_{k_{10-14}} \cdot 0,01 = 0,595 \cdot 10^7, \\ m_{r_3} &= \frac{m_C m_{k_{10-14}} \cdot 0,01 \cdot 10}{m_a} = 0,81 \cdot 10^6.\end{aligned}$$

Подобным же образом вычисляем остальные масштабы:

$$\begin{aligned}m_{r_4} &= 0,522 \cdot 10^5, \\ m_{r_5} &= 0,49 \cdot 10^2, \\ m_{r_6} &= 0,198 \cdot 10^3, \\ m_{r_7} &= 0,698 \cdot 10^3, \\ m_{r_8} &= 0,7 \cdot 10^3.\end{aligned}$$

Окончательно имеем:

$$\begin{aligned}\bar{r}_1 &= \bar{A}, & \bar{r}_5 &= \frac{\bar{\lambda} \bar{a}}{\bar{\gamma}}, \\ \bar{r}_2 &= \bar{C} \bar{k}_{8-7}, & \bar{r}_6 &= \frac{\bar{\mu} \bar{a}}{\bar{\delta}}, \\ \bar{r}_3 &= \frac{\bar{C} \bar{k}_{10-14}}{\bar{a}}, & \bar{r}_7 &= \frac{\bar{\lambda} \bar{k}_{5-13}}{\bar{\gamma}}, \\ \bar{r}_4 &= \bar{C}, & \bar{r}_8 &= \frac{\bar{\mu} \bar{k}_{11-15}}{\bar{\delta}}\end{aligned}$$

с известными масштабами всех переменных.

### Машинные уравнения и блок-схема задачи

Машинная запись уравнений выглядит следующим образом:

$$\frac{d\bar{x}_1}{d\tau} = - \frac{22400 P C_0 m_{x_1}}{C_0 m_{\tau}} \left( \frac{\bar{A}}{m_A} + \frac{\bar{C}}{m_C} \right),$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{x}_2}{d\tau} &= \frac{22400PC_0m_{x_2}}{C_0m_\tau} \left( \frac{\bar{A}}{m_A} - \frac{PC_{03}\bar{r}_5}{m_{r_5}} - \frac{\bar{r}_7}{m_{r_7}} \right), \\
\frac{d\bar{x}_3}{d\tau} &= -\frac{22400PC_0m_{x_3}}{C_{03}m_\tau} \left( \frac{\bar{r}_4}{m_{r_4}} + \frac{PC_{03}\bar{r}_5}{m_{r_5}} + \frac{PC_{03}\bar{r}_6}{m_{r_6}} \right), \\
\frac{d\bar{x}_4}{d\tau} &= \frac{22400PC_0m_{x_4}PC_{03}}{C_0m_\tau} \cdot \frac{\bar{r}_5}{m_{r_5}}, \\
\frac{d\bar{x}_5}{d\tau} &= \frac{22400PC_0m_{x_5}}{C_0m_\tau} \left( \frac{\bar{r}_3}{m_{r_3}PC_{03}} + \frac{\bar{r}_4}{m_{r_4}} - \frac{PC_{03}\bar{r}_6}{m_{r_6}} + \frac{\bar{r}_8}{m_{r_8}} \right), \\
\frac{d\bar{x}_6}{d\tau} &= -\frac{22400PC_0m_{x_6}}{C_{06}m_\tau} \left( \frac{\bar{r}_1}{m_{r_1}} + \frac{4,5\bar{r}_2}{m_{r_2}} + \frac{2\bar{r}_3}{PC_{03}m_{r_3}} + \frac{1,5\bar{r}_4}{m_{r_4}} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{0,5PC_{03}\bar{r}_5}{m_{r_5}} + \frac{0,5PC_{03}\bar{r}_6}{m_{r_6}} + \frac{3,5\bar{r}_7}{m_{r_7}} + \frac{2,5\bar{r}_8}{m_{r_8}} \right), \\
\frac{d\bar{T}}{d\tau} &= \frac{22400PC_0m_T}{C_p m_\tau} \left( \frac{80,55\bar{r}_1}{m_{r_1}} + \frac{497,7\bar{r}_2}{m_{r_2}} + \frac{186,9\bar{r}_3}{PC_{03}m_{r_3}} + \frac{108,6\bar{r}_4}{m_{r_4}} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{43,4PC_{03}\bar{r}_5}{m_{r_5}} + \frac{44,4PC_{03}\bar{r}_6}{m_{r_6}} + \frac{380\bar{r}_7}{m_{r_7}} + \frac{264,8\bar{r}_8}{m_{r_8}} \right) - \frac{B}{m_\tau} (\bar{T} - \bar{T}_x).
\end{aligned}$$

$m_\tau = 1$  и  $m_\tau$  примем равным  $10^4$ .

Подставляя значения масштабов и постоянных, имеем:

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{x}_1}{d\tau} &= -0,068\bar{A} - 0,013\bar{C}, \\
\frac{d\bar{x}_2}{d\tau} &= 0,342\bar{A} - 10,2\bar{r}_5 - 4,82\bar{r}_7, \\
\frac{d\bar{x}_3}{d\tau} &= -0,025\bar{r}_4 - 4,1\bar{r}_5 - 1,02\bar{r}_6, \\
\frac{d\bar{x}_4}{d\tau} &= 2,05\bar{r}_5, \\
\frac{d\bar{x}_5}{d\tau} &= 0,011\bar{r}_3 + 0,026\bar{r}_4 - 1,02\bar{r}_6 - 1,92\bar{r}_8, \\
\frac{d\bar{x}_6}{d\tau} &= -0,04\bar{r}_1 - 0,31 \cdot 10^{-3}\bar{r}_2 - 0,63 \cdot 10^{-2}\bar{r}_3 - 0,011\bar{r}_4 - \\
&\quad - 0,6\bar{r}_5 - 0,318\bar{r}_6 - 1,2\bar{r}_7 - 4,0\bar{r}_8, \\
\frac{d\bar{T}}{d\tau} &= 0,0165\bar{r}_1 + 0,169 \cdot 10^{-3}\bar{r}_2 + 0,315 \cdot 10^{-3}\bar{r}_3 + 0,424 \cdot 10^{-2}\bar{r}_4 + \\
&\quad + 0,27\bar{r}_5 + 0,069\bar{r}_6 + 1,11\bar{r}_7 + 0,77\bar{r}_8 - \frac{B}{m_\tau} (\bar{T} - \bar{T}_x).
\end{aligned} \tag{2.17}$$

Рассмотрим теперь систему (2.17). По величине коэффициентов можно сразу сказать, что некоторые скорости мало влияют на скорость превращения, следовательно, их можно не учитывать. Так,  $\bar{r}_2$  и  $\bar{r}_3$  вообще исчезают из уравнений. Другие, такие как  $\bar{r}_5$ ,  $\bar{r}_6$ , представляют собой малые величины, максимум которых может достигать (однако никогда не достигает) лишь 10 в. Но их влияние на скорость превращения мо-

жет быть заметным из-за больших коэффициентов, поэтому вычисление этих величин нужно производить с повышенной точностью.

Поясним сказанное примером. Если  $\bar{r}_5$ , например, имеет величину 2—3 в, а ее вычисление в машине, учитывая сложность функции, достигает абсолютной ошибки 1 в (30—50%), то и вычисление  $\bar{x}_4$ , одной из самых важных переменных, будет произведено с ошибкой в 30—50%. Исправить это можно двояким способом: либо увеличить максимальную величину  $\bar{r}_5$ , не увеличивая абсолютной погрешности, либо увеличить точность вычисления  $\bar{r}_5$ . Первую возможность можно осуществить, увеличив  $\bar{r}_5$  в несколько раз с помощью масштабного усилителя (эффект будет достигнут при увеличении по крайней мере в 10 раз), имея в виду, что линейные блоки имеют погрешность 0,1—0,2%. Тем самым мы примерно на порядок повысим точность вычисления  $\bar{r}_5$ . Однако сделать это можно, если  $\bar{x}_2$  не превышает в процессе решения 10 в (см. выражение для  $\bar{\lambda}$ ), поэтому лучше применить более точные блоки перемножения деления, некоторое количество которых имеется в машине МН-14. Это время — импульсные блоки, точность которых примерно на порядок выше обычных диодных блоков. Наибольший эффект достигается, когда применяют оба метода. Для этого следует провести несколько пробных решений с тем, чтобы определить, в какое количество раз можно увеличить  $\bar{\lambda}$  с помощью масштабных блоков. Таким же образом нужно повысить точность вычисления и остальных переменных. Проведя подобную корректировку, получим окончательное выражение для системы уравнений при следующих значениях констант:

$$C_0 = 0,1; \quad C_{03} = 0,05; \quad C_{06} = 0,17; \quad P = 3 \text{ атм};$$

$$\frac{d\bar{x}_1}{d\tau} = -0,0682\bar{A} - 0,013\bar{C},$$

$$\frac{d\bar{x}_2}{d\tau} = 0,342\bar{A} - 2\bar{r}_5 - 0,193r_7,$$

$$\frac{d\bar{x}_3}{d\tau} = -0,0257\bar{r}_4 - 0,81\bar{r}_5 - 0,204\bar{r}_6,$$

$$\frac{d\bar{x}_4}{d\tau} = 0,41\bar{r}_5, \quad (2.18)$$

$$\frac{d\bar{x}_5}{d\tau} = 0,0285\bar{r}_4 - 0,204\bar{r}_6 - 1,92\bar{r}_8,$$

$$\frac{d\bar{x}_6}{d\tau} = -0,04\bar{r}_1 - 0,011\bar{r}_4 - 0,12\bar{r}_5 - 0,636\bar{r}_6 - 0,048\bar{r}_7 - 4,0\bar{r}_8,$$

$$\frac{d\bar{T}}{d\tau} = 0,0165\bar{r}_1 + 0,0536\bar{r}_5 + 0,14\bar{r}_6 + 0,045\bar{r}_7 + 0,77\bar{r}_8 - \frac{B}{m_\tau} (\bar{T} - \bar{T}_x).$$

Теперь, как видно из (2.18), машинные коэффициенты отличаются друг от друга на меньшую величину, чем в (2.17), значит, машинные величины переменных также меньше отличаются друг от друга. Так выглядит окончательная машинная система уравнений, описывающая синтез НАКа. Блок-схема модели приведена на рис. 2.2.

В заключение отметим, что моделирование процесса синтеза НАКа является примером исследования каталитических процессов со сложной системой реакций, причем столь сложные системы моделируются на аналоговых машинах с достаточной точностью.

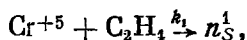
В данном случае не ставилась задача нахождения величин констант скоростей реакции или кинетической схемы процесса. Однако и такие задачи могут успешно решаться с помощью аналоговых вычислительных машин. Примером этого служит исследование на машине МН-14 кинетики полимеризации этилена.

### Полимеризация этилена на окисном катализаторе

Полимеризация этилена на окиснохромовом катализаторе — процесс сложный: скорость реакции изменяется во времени и зависит от концентрации не только мономера, но и катализатора и примесей, присутствующих в этилене и растворителе. Сложность процесса приводит к тому, что его не удастся описать эмпирическим кинетическим уравнением, справедливым в достаточно широком интервале изменения параметров (концентраций мономера, катализатора, ингибиторов). Правильным путем описания кинетики такого процесса является составление математического описания на основе представлений о механизме его протекания.

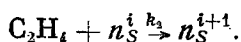
Для объяснений данных, полученных при изучении кинетики полимеризации этилена, была принята следующая схема протекания процесса [18].

1. Реакция инициирования происходит при взаимодействии этилена с активным компонентом катализатора:

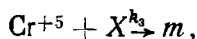


где  $n_S^1$  — центр роста полимерной цепи, находящейся на поверхности катализатора, а индекс сверху означает степень полимеризации активной полимерной цепи.

2. Реакция роста происходит при взаимодействии молекулы этилена с активной полимерной цепью:

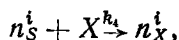


3. Помимо реакции инициирования, активный компонент катализатора расходуется в реакции с сильным ингибитором  $X$ :



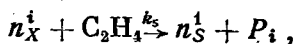
где  $m$  — неактивный продукт взаимодействия.

4. Между активной полимерной молекулой и сильным ингибитором протекает следующая реакция:



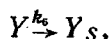
где  $n_X^i$  — продукт взаимодействия полимерной молекулы ( $i$  — степень полимеризации) с ингибитором, способный вступать в реакцию регенерации цепи с этиленом.

5. Реакция регенерации цепи



где  $P_i$  — неактивная молекула полимера со степенью полимеризации.

6. Происходит адсорбция слабого ингибитора  $Y$  на поверхности катализатора



где  $Y_S$  — адсорбированная молекула слабого ингибитора. После заполнения определенной доли поверхности адсорбция приводит к блокировке центров роста полимерной цепи.

Система уравнений, соответствующая данной схеме процесса, имеет вид:

$$\begin{aligned}\frac{d[n_S]}{dt} &= k_1 [Cr^{+5}] C - k_4 [n_S] [X] + k_5 [n_X] C - k_7 \frac{d([Y_S] - [Y_S'] )}{dt} \\ \frac{d[n_X]}{dt} &= k_1 [n_S] [X] - k [n_X] C, \\ -\frac{d[X]}{dt} &= k_4 a S_{\text{эф}} [n_S] [X] + k_3 a S_{\text{эф}} [Cr^{+5}] [X] - C_X \frac{dG}{dt}, \\ -\frac{d[Cr^{+5}]}{dt} &= k_1 [Cr^{+5}] C + k_3 [Cr^{+5}] [X], \\ \frac{dG}{dt} &= k_2 a S_{\text{эф}} [n_S] C, \\ \frac{d[Y]}{dt} &= C_Y \frac{dG}{dt} - k_6 a S_{\text{эф}} [Y], \\ \frac{d[Y_S]}{dt} &= k_6 [Y].\end{aligned}\quad (2.19)$$

- где  $a$  — концентрация катализатора в растворителе;  
 $C$  — концентрация этилена в растворителе;  
 $C_X$  — содержание сильного ингибитора в мономере;  
 $C_Y$  — содержание слабого ингибитора в мономере;  
 $[Cr^{+5}]$  — поверхностная концентрация активного компонента;  
 $\frac{dG}{dt}$  — скорость полимеризации;  
 $[n_S]$  — поверхностная концентрация центров роста полимерных цепей;  
 $[n_X]$  — поверхностная концентрация промежуточного продукта взаимодействия активной полимерной цепи с сильным ингибитором;  
 $S_{\text{эф}}$  — эффективная удельная поверхность катализатора;  
 $-[Y]$  — концентрация слабого ингибитора в объеме;  
 $-[Y_S]$  — поверхностная концентрация адсорбированного слабого ингибитора;  
 $[Y_S']$  — предельная поверхностная концентрация слабого ингибитора;  
 $-[X]$  — концентрация сильного ингибитора в объеме;  
 $-t$  — время;  
 $-k_1 \div k_7$  — константы скоростей реакций.

Таким образом, процесс описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений, которые удобно решать на АВМ. Определение масштабов переменных, расчет коэффициентов машинного уравнения, составление блок-схемы не вызывают принципиальных затруднений. Блок-схема задачи приведена на рис. 2.3. Здесь же даны значения масштабов переменных. В своей первоначальной постановке задача исследования заключалась в определении констант скоростей отдельных стадий процесса по экспериментальной зависимости скорости полимеризации от времени. На рис. 2.4 приведена кинетическая кривая, полученная на машине; точки на этом рисунке соответствуют экспериментальным данным. Совпадение расчетной кривой с экспериментальными данными наблюдается при следующих значениях констант элементарных стадий:  $k_1 = 8,3 \cdot 10^{-5}$ ;  $k_2 = 1 \cdot 10^6$ ;  $k_3 = 22$ ;  $k_4 = 1 \cdot 10^3$ ;  $k_5 = 2,3 \cdot 10^{-4}$ ;  $k_6 = 1,210^{-6}$ ;  $k_7 = 3,75 \cdot 10^{-6}$ ;  $[Y_S]' = 2,5 \cdot 10^{-6}$ .

С полученными значениями констант уравнения (2.19) хорошо описывают и другие экспериментальные данные: зависимости скорости полимеризации от давления, концентрации катализатора и т. д. [18, 19].

При решении этой задачи поиск констант проводился вручную, степень совпадения экспериментальной и расчетной кривых определялась визуально. Такой метод поиска констант обладает как преимуществами, так и недостатками. К числу первых относятся: возможность более углубленно понять свойства математического описания, непосредственно в ходе поиска определить недостатки той или иной схемы процесса, как говорится, «почувствовать процесс». Визуальное сравнение опытной и экспериментальной кривых позволяет детальнее отразить

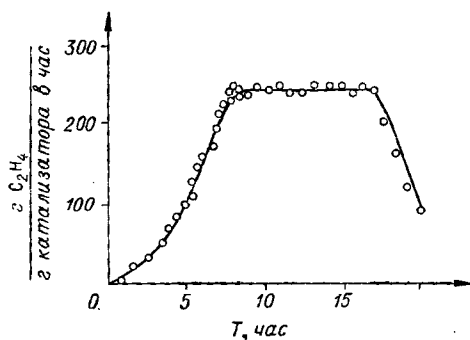
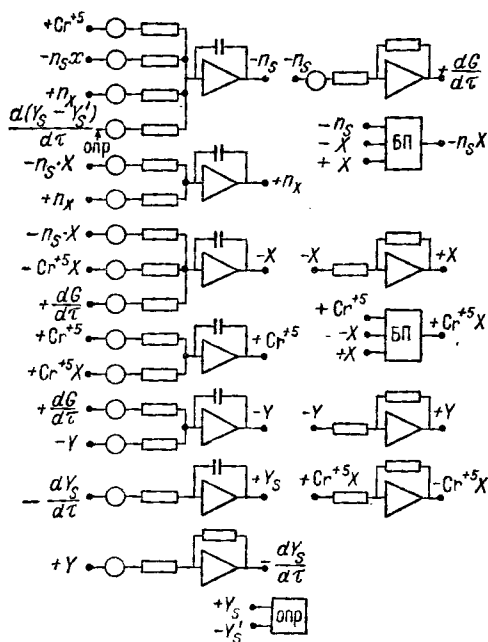


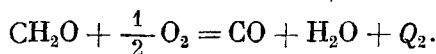
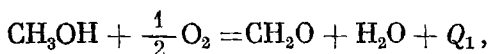
Рис. 2.4. Сопоставление результатов моделирования процесса полимеризации этилена (сплошная линия) с экспериментальными результатами (точки).

Рис. 2.3. Блок-схема модели полимеризации этилена.

характерные особенности поведения кривой. Недостаток такого метода — сравнительно длительное время, затрачиваемое на поиск констант, хотя, надо отметить при этом, время поиска удлинится несущественно, и ручной подбор констант был весьма эффективен, особенно на первом этапе, когда еще уточнялась кинетическая схема процесса.

### Окисление метанола в формальдегид на окисных катализаторах

Экспериментальные лабораторные данные, полученные на проточно-циркуляционной установке, позволили выяснить, что процесс окисления метанола в формальдегид на окисном катализаторе состоит из двух последовательных необратимых реакций [20]:



Наблюдаемые скорости на зерне  $3 \times 3$  мм достаточно хорошо описываются уравнениями:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{d\tau} &= k_1(1-x), \\ \frac{dz}{d\tau} &= k_2 \frac{y}{1+aC_0x},\end{aligned}\tag{2.20}$$

где

$$k_1 = k_{10} e^{-E_1/RT} = 3,92 \cdot 10^4 e^{-\frac{9730}{RT}},$$

$$k_2 = k_{20} e^{-E_2/RT} = 3,42 \cdot 10^2 e^{-\frac{6750}{RT}},$$

$x, y, z$  — общая степень превращения метанола, степень превращения метанола в формальдегид и полное горение соответственно;

$E_1, E_2$  — энергии активации основной и побочной реакции;

$C_0$  — концентрация метанола в спирто-воздушной смеси;

$a$  — адсорбционный коэффициент.

Уравнения, описывающие процесс окисления метанола в слое идеального вытеснения, в соответствии с уравнением (3) из табл. 1.1 имеют вид:

$$\frac{dx}{d\tau} = k_1(1-x),$$

$$\frac{dy}{d\tau} = k_1(1-x) - k_2 \frac{y}{1+aC_0x},\tag{2.21}$$

$$\frac{dT}{d\tau} = \Delta T_{ад1} C_0 k_1 (1-x) + \Delta T_{ад2} C_0 k_2 \frac{y}{1+aC_0x} - B(T - T_x),$$

где  $T$  — температура в зоне контакта;

$B$  — параметр теплоотвода ( $B = \frac{4\alpha}{Dc_p}$ );

$\alpha$  — коэффициент теплопередачи;

$c_p$  — теплоемкость реакционной смеси;

$D$  — внутренний диаметр трубок;

$$\Delta T_{ад1} = \frac{Q_1 \cdot 0,01}{c_p} = 52,3^\circ; \quad \Delta T_{ад2} = \frac{Q_2 \cdot 0,01}{c_p} = 75,5^\circ$$

— величины адиабатического разогрева реакционной смеси, содержащей 1% метанола и 1% формальдегида при полном превращении.

Условия моделирования процесса окисления метанола весьма благоприятны по следующим причинам.

а) Небольшое количество реагирующих компонент, в результате чего мы имеем систему лишь из трех уравнений.

б) Сравнительно малые энергии активации в совокупности с небольшим рабочим интервалом температур определяют слабую нелинейность экспонент  $k_1$  и  $k_2$ . В результате решение моделируемых уравнений остается устойчивым даже при максимальных температурах. Остановимся на этом несколько подробнее. Неустойчивость решения может возникнуть по двум причинам. Первая — неустойчивость решения описывающих процесс уравнений (по Ляпунову), разобранный в § 2. В таких случаях, как уже говорилось, следует применять специфические способы решения. Вторая — неустойчивость, возникающая из-за значительной крутизны экспоненциальных зависимостей (речь идет об уравнениях вида (2.1)). Правильнее сказать, что здесь существует большая чувствительность к малым изменениям параметров и начальных условий, т. е. большая параметрическая чувствительность. В самом деле



большая крутизна экспоненты — это значит большой коэффициент усиления нелинейного блока, т. е. небольшие изменения на его входе сильно сказываются на выходе, в конечном счете на температуре. Кроме того, при больших коэффициентах усиления (6—8) нелинейный блок ведет себя весьма нестабильно и ошибка в воспроизведении функции в этой области может достигать 5—10% только за счет дрейфа нуля усилителей и колебаний опорного напряжения в точках излома аппроксимирующей функции, вызванных колебаниями напряжения питания. Таким образом, отсутствие крутых нелинейностей намного упрощает задачу моделирования каталитических процессов.

в) Несложные кинетические зависимости. Функции  $f_1(x)$  и  $f_2(y)$  легко и с небольшими погрешностями могут быть реализованы на машине. Кроме того, первый порядок по первой реакции в (2.21) упрощает получение решения в области степеней превращения  $x$ , близких к единице, так как линейный член  $1 - x$  вычисляется в машине с относительно большей точностью.

Не давая промежуточных выкладок и масштабирования уравнений (2.21), приведем машинную систему уравнений при следующих значениях констант и параметров:  $a = 1,1$ ;  $B = 20$ ;  $C = 6,5\%$ ;  $\kappa_1(T)$  и  $\kappa_2(T)$  — см. выше.

Машинное уравнение при масштабах переменных  $m_{k_1} = 3,4$ ;  $m_{k_2} = 43,5$ ;  $m_x = 100$ ;  $m_y = 100$ ;  $m_T = 0,5$  и  $m_z = 30$  имеет вид

$$\frac{dx}{d\tau} = 0,98\bar{k}_1(\bar{T})(100 - \bar{x}),$$

$$\frac{dy}{d\tau} = 0,98\bar{k}_1(\bar{T})(100 - \bar{x}) - 0,093 \frac{\bar{k}_2(\bar{T})\bar{y}}{12,3 + 0,88\bar{x}},$$

$$\frac{d\bar{T}}{d\tau} = 0,59\bar{k}_1(\bar{T})(100 - \bar{x}) + 0,228 \frac{\bar{k}_2(\bar{T})\bar{y}}{12,3 + 0,88\bar{x}} - 0,535(\bar{T} - \bar{T}_x).$$

Графики нелинейностей и блок-схема этих уравнений приведены на рис. 2.5 и 2.6.

На рис. 2.7 изображены профили температуры и степеней превращения, полученные на машине, а точками нанесены значения температуры, снятые на работающем аппарате.

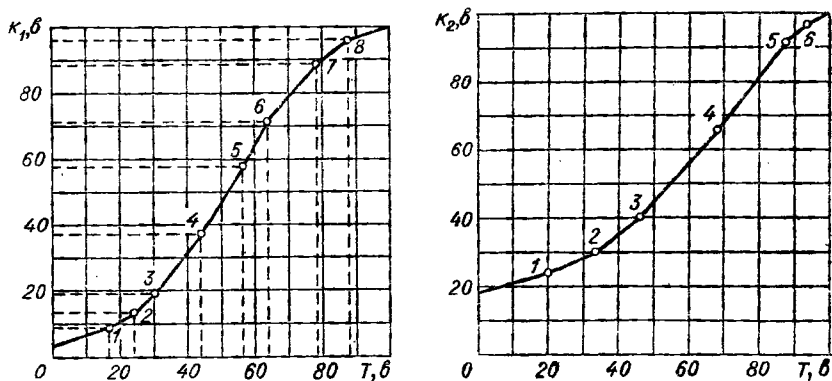


Рис. 2.5. Нелинейности уравнений математического описания процесса окисления метанола в формальдегид.

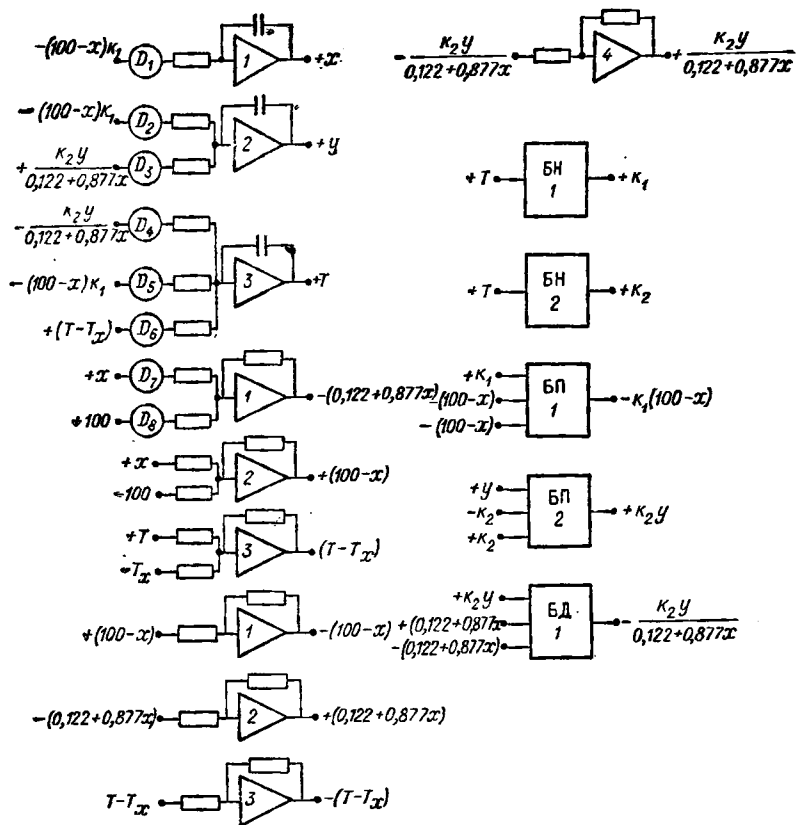


Рис. 2.6. Блок-схема модели процесса окисления метанола в формальдегид.

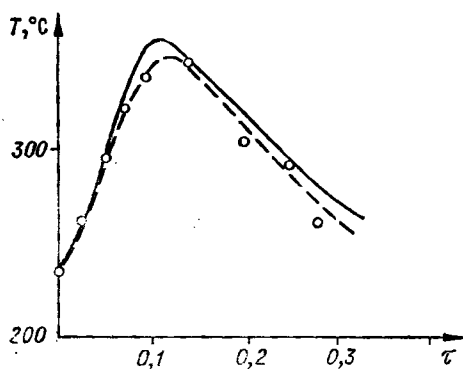
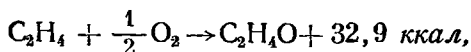


Рис. 2.7. Сопоставление результатов расчета процесса окисления метанола (сплошная линия) и экспериментальных данных (точки).

Окисление этилена представляется в виде двух параллельно протекающих реакций [21]:



Математическое описание процесса, протекающего в трубке с неподвижным слоем катализатора, для смеси 4% этилена с воздухом имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= (k_1 + k_2) \frac{1-x}{1+5,7x}, \\ \frac{dT}{d\tau} &= (\Delta T_{ад1} k_1 + \Delta T_{ад2} k_2) \frac{1-x}{1+5,7x} - B(T - T_x), \end{aligned} \quad (2.22)$$

где  $\Delta T_{ад1} = 138^\circ C$ ,  $\Delta T_{ад2} = 1876^\circ C$  — величины адиабатического разогрева по первой и второй реакциям соответственно;

$\tau = \frac{v_k}{V_0}$  — условное время контакта;

$B = \frac{4\alpha}{c_p D}$  — параметр теплоотвода;

$\alpha$  — коэффициент теплопередачи от слоя катализатора к охлаждающей жидкости;

$D$  — диаметр трубки;

$c_p$  — теплоемкость газовой смеси;

$k_1(T)$ ,  $k_2(T)$  — константы первой и второй реакций.

При составлении математического описания процесса принималось, что в результате большой скорости реагирующей смеси и повышенных давлений продольным и поперечным переносом тепла и вещества можно пренебречь.

Сравнивая реакции окисления метанола и окисления этилена, а также математические описания этих процессов (уравнения (2.21) и (2.22)), можно заметить, что между ними имеется много общего. Поэтому и методы моделирования указанных процессов почти не отличаются друг от друга. Небольшое отличие заключается в более высоких тепловых эффектах реакции окисления этилена, более крутых экспоненциальных зависимостях констант скоростей от температуры и, следовательно, большей параметрической чувствительности процесса.

Рабочий температурный интервал для серебряного катализатора составляет  $150-320^\circ C$ . В соответствии с этим выбираются масштабы переменных  $m_x = 100$  в,  $m_y = 100$  в,  $m_T = 0,59$  в/град,  $m_{k_1} = 11,56$ ,  $m_{k_2} = 8,62$ .

Экспоненциальные зависимости констант скоростей  $k_1$  и  $k_2$  от температуры  $T$  и функции  $\frac{1-x}{1+5,7x}$  представлены на рис. 2.8. В этом случае машинное уравнение имеет вид (для значения параметра теплоотвода  $B=60$ ).

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{x}}{d\bar{\tau}} &= 0,202 (0,427\bar{k}_1 + 0,573\bar{k}_2) \bar{f}(\bar{x}), \\ \frac{d\bar{T}}{d\bar{\tau}} &= 2,24 (0,0314\bar{k}_1 + 0,573\bar{k}_2) \bar{f}(\bar{x}) - 0,6 (\bar{T} - \bar{T}_x), \end{aligned}$$

а блок-схема его представлена на рис. 2.9.

Система уравнений (2.22) достаточно хорошо описывает процесс окисления этилена кислородом в этилено-воздушной смеси, рис. 2.10 показывает хорошее совпадение результатов расчета на машине МН-7 и экспериментальных замеров распределения температур и степени превращения по длине трубчатого реактора.

Если реакционная смесь на входе в аппарат содержит не 19—20% кислорода (этилена — воздушная смесь), а 7—9% (работа аппарата в циркуляционной схеме), то зависимость скорости реакции от температуры и степени превращения, использованная в математическом описании

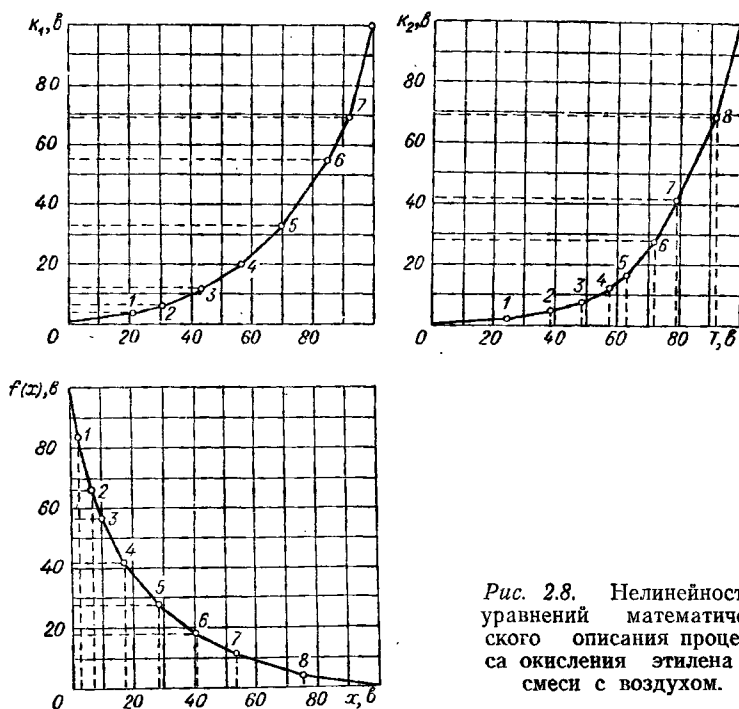


Рис. 2.8. Нелинейности уравнений математического описания процесса окисления этилена в смеси с воздухом.

(2.22), недостаточно хорошо описывает кинетику процесса. В этом случае надо пользоваться более точным уравнением [22], процесс описывается системой уравнений, аналогичной (2.22), но с более сложным кинетическим выражением:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= (k_1 + k_2) f(x, T), \\ \frac{dy}{d\tau} &= k_2 f(x, T), \\ \frac{dT}{d\tau} &= (\Delta T_{ад} k_1 + \Delta T_{ан} k_2) f(x, T) - B(T - T_x), \\ \pm \frac{dT_x}{d\tau} &= B_1(T - T_x). \end{aligned} \right\} \quad (2.23)$$

Функция  $f(x, T)$  может быть представлена в виде

$$f(x, T) = \frac{1 - x}{1 + 8 \frac{a}{b} (1 - x) + k_3 (5ax + d)},$$

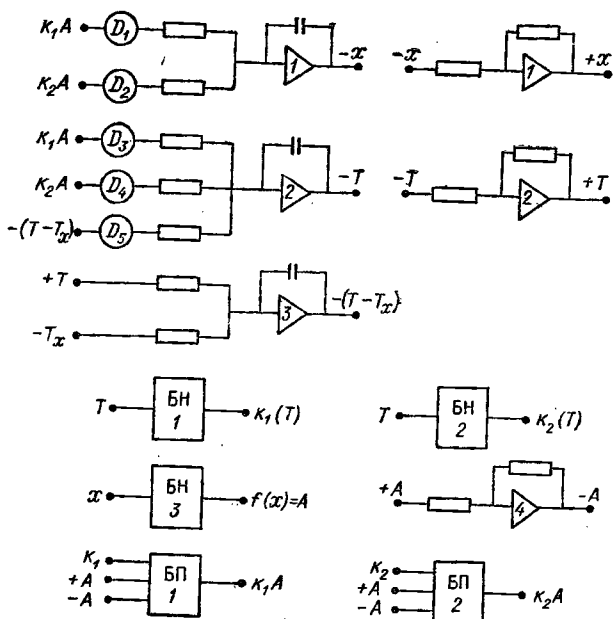


Рис. 2.9. Блок-схема модели процесса окисления этилена в смеси с воздухом.

где  $k_3 = 3,91 \cdot 10^{-4} e^{\frac{7000}{RT}}$ ;

$a$  — концентрация этилена в исходной смеси;

$b$  — концентрация кислорода;

$d$  — концентрация  $\text{CO}_2$ .

В системе (2.23) последнее уравнение соответствует тепловому балансу теплоносителя, если температура последнего меняется по высоте трубок с катализатором (при циркуляции жидкого теплоносителя). В этом случае  $B_1 = 0,015$ .

Если температура теплоносителя  $T_x$  постоянна (например, кипящая вода), то последним уравнением можно пренебречь. Хотя  $f(x, T)$  в уравнениях (2.23) сложнее, чем в (2.22), однако принципиальных затруднений для моделирования на АВМ здесь не встречается. При значениях констант

$$k_1 = 8,66 \cdot 10^3 e^{\frac{8100}{RT}},$$

$$k_2 = 1,85 \cdot 10^6 e^{\frac{14100}{RT}},$$

$$B = 60, \quad a = 4\%, \quad b = 6,5\%, \quad d = 7\%$$

и масштабах переменных

$$m_x = 100, \quad m_y = 100, \quad m_T = 0,59,$$

$$m_{k_3} = 61,3, \quad m_f = 45, \quad m_\tau = 100$$

машинное уравнение выглядит следующим образом:

$$\frac{d\bar{x}}{d\bar{\tau}} = 0,045 \bar{N} \bar{f}(\bar{x}, \bar{T}),$$

$$\frac{d\bar{y}}{d\bar{\tau}} = 0,0192\bar{k}_2\bar{f}(\bar{x},\bar{T}),$$

$$\frac{d\bar{T}}{d\bar{\tau}} = 0,302E\bar{f}(\bar{x},\bar{T}) - 0,6(\bar{T} - \bar{T}_x),$$

где

$$\bar{N} = 0,427k_1 + 0,573k_2,$$

$$E = 0,067\bar{k}_1 + 0,769\bar{k}_2.$$

Нелинейности и блок-схема представлены на рис. 2.11 и 2.12.

Отметим, что, хотя для построения функции  $\bar{f}(x, T)$  требуется 3 нелинейных блока (1 нелинейность, 1 блок умножения и 1 деления) и 3 линейных (сложения), точность вычисления достаточна, поскольку степени превращения меняются в небольших пределах, температурный профиль имеет «хороший вид», без резких «пииков» и параметрическая чувствительность процесса невелика [23]. Но об этом подробнее — в следующем разделе.

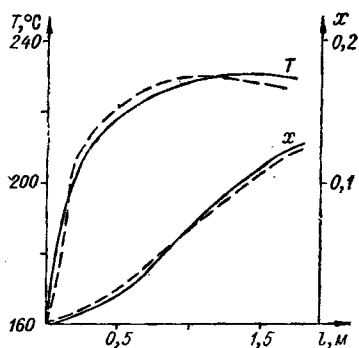


Рис. 2.10. Результаты расчета (сплошная линия) и эксперимента (пунктирная линия) для процесса окисления этилена в воздухе.

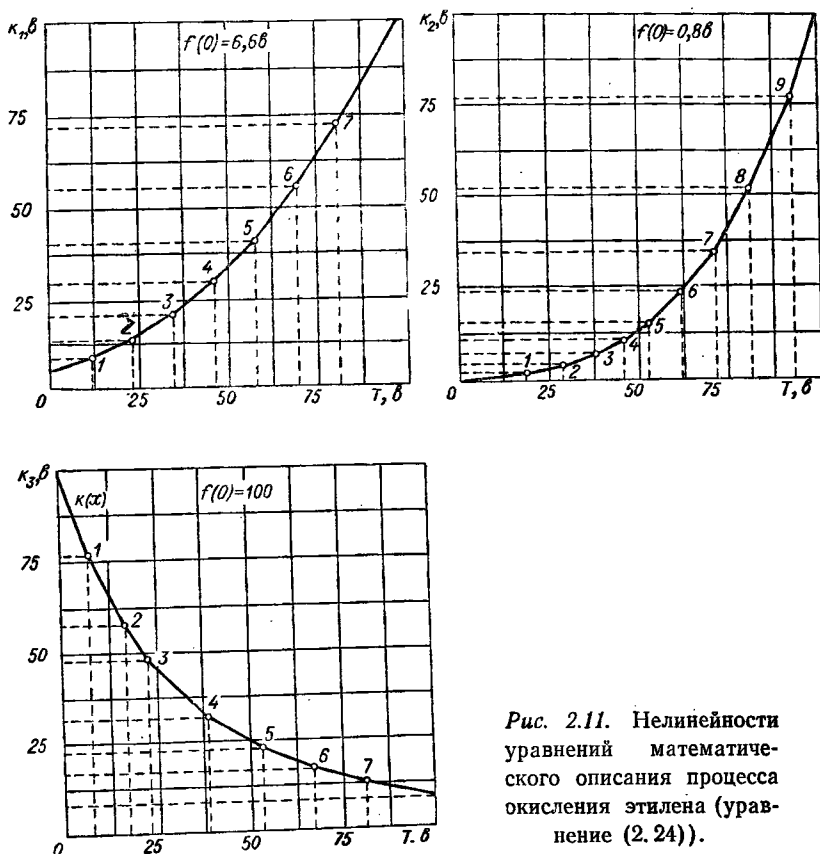


Рис. 2.11. Нелинейности уравнений математического описания процесса окисления этилена (уравнение (2.24)).

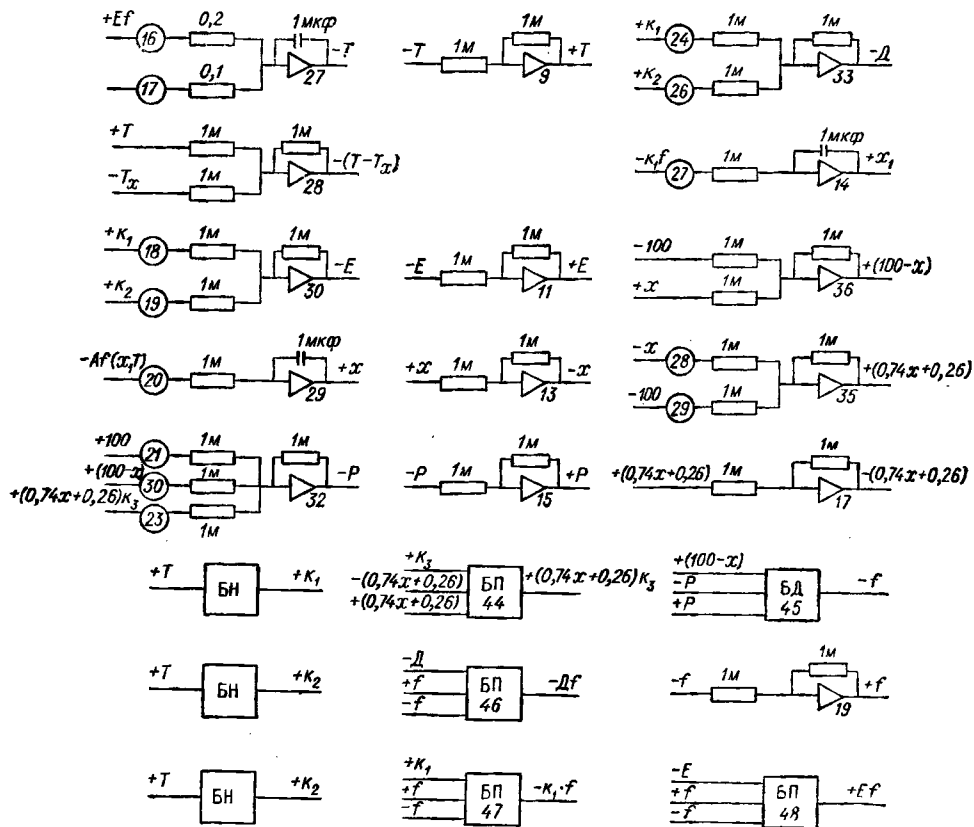


Рис. 2.12. Блок-схема модели процесса окисления этилена (уравнение (2.24)).

$D_{10}=0,0692$ ,  $D_{17}=0,06$ ,  $D_{18}=0,098$ ,  $D_{19}=0,92$ ,  $D_{20}=0,0456$ ,  $D_{21}=0,0222$ ,  $D_{30}=0,109$ ,  
 $D_{33}=0,98$ ,  $D_{34}=0,525$ ,  $D_{35}=0,475$ ,  $D_{37}=0,024$ ,  $D_{38}=0,74$ ,  $D_{39}=0,26$ .

## Парафазное гидрохлорирование ацетилена

Остановимся еще на одном процессе, проводимом в трубчатом реакторе с теплоотводом — парафазное гидрохлорирование ацетилена. Рассмотрим его с точки зрения оценки точности решения процессов с усложненной формой кинетического уравнения.

Математическое описание процесса имеет вид [24]

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= \frac{k(T) P^2 (1-x)(\alpha-x)}{C_0(1+\alpha-x)^2 \left[ k'(T) + \frac{P(\alpha-x)}{1+\alpha-x} \right]}, \\ \frac{dT}{d\tau} &= \Delta T_{ад} \frac{dx}{d\tau} - B(T - T_x), \\ \frac{dT_x}{d\tau} &= B_1(T - T_x). \end{aligned} \right\} \quad (2.24)$$

Обозначения здесь обычные. Давление  $P$  и соотношение  $\alpha = \text{HCl} : \text{C}_2\text{H}_2$  в исходной смеси — постоянные величины. Как видно из уравнений, для воспроизведения кинетического выражения необходимо ис-

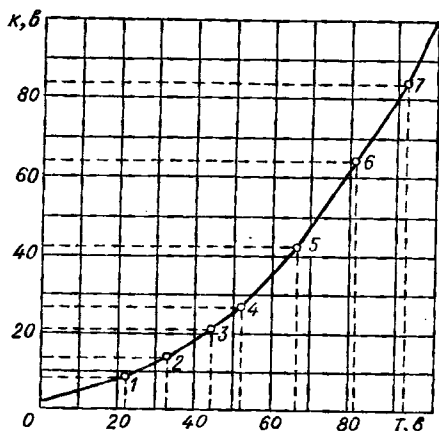
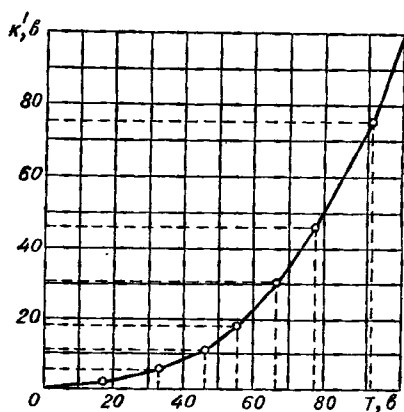


Рис. 2.13. Нелинейности уравнений математического описания процесса парафазного гидрохлорирования ацетилена.

пользовать три линейных блока (сумматора), один блок универсальной нелинейности, четыре блока произведения и два — деления, т. е. всего семь нелинейных блоков.

Для числовых значений

$$k(T) = 4,53 \cdot 10^{-5} e^{-\frac{6000}{RT}}; \quad P = 1,1 \div 1,6 \text{ атм};$$

$$\alpha = 1 \div 1,9; \quad C_0 = \frac{1}{1 + \alpha};$$

$$k'(T) = 0,515 \cdot 10^4 e^{-\frac{8660}{RT}}; \quad \Delta T_{\text{ад}} = 1440^\circ \div 945^\circ \text{ C};$$

$$B = 0,99; \quad B_1 = 0,01$$

и масштабов переменных  $m_x = 100$ ;  $m_T = 0,55$ ;  $m_{T_x} = 0,55$  (для интервала температур  $40 \div 220^\circ \text{C}$  нелинейности и блок-схема приведены на рис. 2.13 и 2.14.

Основная сложность решения уравнения (2.24) на АВМ заключается в том, что при достаточно большой степени превращения (а по условиям процесса степень превращения достигает величины, близкой к единице) в выражении для кинетического уравнения основную роль начинает играть малая разность двух сравнительно больших величин  $(1-x)$ . Сочетание таких неблагоприятных факторов, как малая разность двух больших величин, а также использование сравнительно большого количества нелинейных блоков для вычисления кинетического выражения дает основание думать, что погрешность при моделировании этого процесса будет очень велика. Оценку погрешности надежнее всего можно произвести с помощью сравнения с более точным решением. Такое решение было получено на цифровой машине. Сравнение аналоговых и цифровых решений показано на рис. 2.15 (пунктир — аналоговое решение, сплошная линия — цифровое). Максимальная погрешность для функции  $T(\tau)$  достигает в некоторых случаях 15%, а по  $x(\tau)$  — 5%. Причем, если на участке возрастания температуры до максимума совпадение почти полное, то, начиная с максимума и далее, погрешность становится большой. Объяснение этому можно найти как раз в том, что в начале слоя величина  $x$  мала, и поэтому  $\frac{dx}{d\tau}$  вычисляется с большой относительной точностью. Кроме того, как можно за-



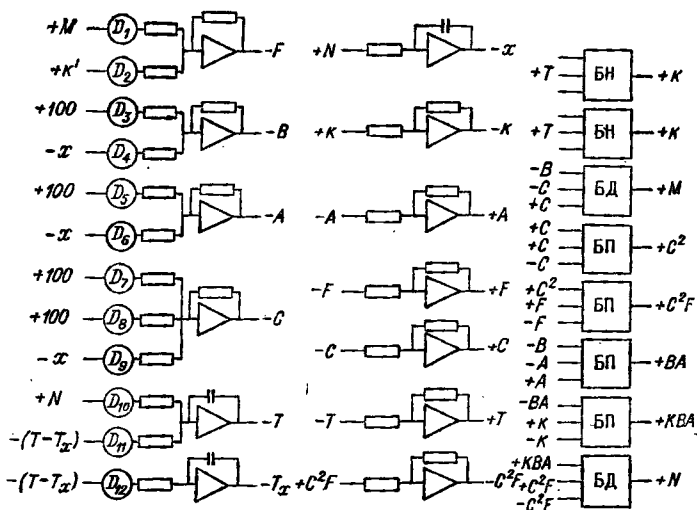


Рис. 2.14. Блок-схема модели процесса гидрохлорирования ацетилена.

ключить из результатов моделирования предыдущих экзотермических процессов [20, 23], область наибольшей параметрической чувствительности находится в окрестности максимума  $T(\tau)$ . Вследствие этого именно в максимуме  $T(\tau)$  погрешности в выполнении отдельных операций и в величине параметров сказываются более всего.

Таким образом, кинетические уравнения, сходные по сложности с уравнениями процесса гидрохлорирования ацетилена, по-видимому, сложны настолько, что проводить их моделирование на аналоговых машинах имеет смысл только либо для получения предварительных результатов, либо для процессов, имеющих малую параметрическую чувствительность или малые степени превращения, как, например, окисление этилена. В остальных случаях рационально прибегать к помощи цифровых машин.

#### § 4. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ С КРАЕВЫМИ УСЛОВИЯМИ

Рассмотренные ранее примеры исследования каталитических процессов сводились к решению систем обыкновенных дифференциальных нелинейных уравнений с начальными условиями. Решение таких задач принципиально возможно всегда; возникающие трудности связаны лишь с ограниченной точностью аналоговых машин. Однако, как сказано в гл. I, часто при исследовании каталитических процессов возникают краевые задачи, которые во многих случаях нельзя решать как задачи с начальными условиями. Перечислим их еще раз. Первая — изучение коротких стационарных слоев катализатора с небольшими скоростями газов. В этом случае должны учитываться продольная диффузия и теплопроводность. Вторая задача — моделирование псевдоожиженного слоя, где в результате большой теплопроводности слоя можно пренебречь температурным градиентом по слою, но необходимо учитывать продольную диффузию веществ. Третья задача — диффузия в порах зерна катализатора. В этот круг вопросов должно входить и решение нестационарных задач, связанных с этими же проб-

лемами. Сюда также отнесем решение уравнений, описывающих процесс в слое идеального вытеснения, но с условиями, заданными на разных границах (краевая задача). Эта система представлена в табл. 1.1 (уравнения (4)).

Прежде всего нужно сказать, что поиск методов решения подобных задач на аналоговых машинах имеет смысл, хотя уж разработаны методы решения их на цифровых машинах, так как в этом случае по-прежнему сохраняются общие преимущества аналоговой техники, среди которых главным становится скорость решения. В то же время основной недостаток аналоговых машин — малая точность — выступает при этом в полной мере и становится подчас принципиальным препятствием решению подобных задач. Это также важно рассмотреть, поскольку решение без тщательной оценки его точности может ввести в заблуждение своей кажущейся правдоподобностью. Например, нельзя оценивать точность решения нестационарной задачи путем сравнения установившегося значения решения с аналитическим решением стационарной задачи, так как при совпадении установившихся значений решений переходный процесс, полученный на машине, может очень сильно отличаться от истинного.

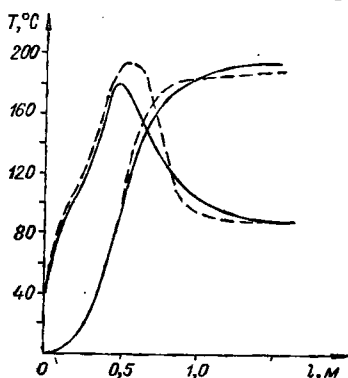


Рис. 2.15. Решение уравнений, описывающих процесс парафазного гидрохлорирования ацетилена (пунктир — аналоговое решение, сплошная линия — цифровое).

#### Псевдооживленный слой катализатора и изотермический процесс с продольным смещением

Перейдем к методике решения уравнений, описывающих двухфазную модель псевдооживленного слоя. Для примера будет рассматриваться конкретный случай: моделирование процесса окисления этилена в окись этилена в псевдооживленном слое катализатора. Процесс описывается системой уравнений

$$\begin{aligned} \frac{1}{Pe} \frac{d^2x}{d\xi^2} - \frac{dx}{d\xi} + k\omega(x) - \beta(x - y) &= 0, \\ \frac{dy}{d\xi} + a\beta(x - y) &= 0 \end{aligned} \quad (2.25)$$

с краевыми условиями

$$\begin{aligned} \left( \frac{dx}{d\xi} \right)_{\xi=0} &= Pex|_{\xi=0}; \quad \frac{dx}{d\xi} \Big|_{\xi=1} = 0, \\ y|_{\xi=0} &= 0 \end{aligned}$$

(здесь  $a$  — доля потока в фазе пузырей). Для процесса окисления этилена

$$\omega(x) = \frac{1-x}{1+5,7x}.$$

Общая степень превращения на выходе из слоя определяется соотношением

$$x_{\text{общ}} = ax_k + (1-a)y_k,$$

где  $x_k$  и  $y_k$  — степени превращения в конце соответствующей фазы.

Рассмотрим вначале решение уравнения, подобного (2.25), но с линейной функцией  $\omega(x) = 1 - x$  и коэффициентом  $\beta = 0$ . Моделирование уравнения позволит определить точность машинного решения путем сравнения последнего с аналитическим решением, которое в этом случае легко получить.

Следовательно, решается уравнение

$$\frac{1}{Pe} \frac{d^2x}{d\xi^2} - \frac{dx}{d\xi} + k(1-x) = 0, \quad (2.26)$$

$$\left. \frac{dx}{d\xi} \right|_{\xi=0} = Pex|_{\xi=0}; \quad \left. \frac{dx}{d\xi} \right|_{\xi=1} = 0.$$

Этим уравнением описывается также изотермический процесс с продольным смещением, и потому выводы, полученные ниже, будут верны и для решения задач продольного смещения.

Разберем методику решения уравнения (2.26) конечно-разностным методом. Границы его применения будут оценены в дальнейшем. Конечно-разностное выражение для (2.26) запишется следующим образом:

$$\frac{1}{Pe} \frac{x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}}{\Delta\xi^2} - \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2\Delta\xi} + k(1-x_i) = \frac{dx_i}{dt}, \quad (2.27)$$

$$i = 1, \dots, m,$$

$$\Delta\xi = \frac{1}{m},$$

$$\frac{x_1 - x_0}{\Delta\xi} = Pex_0; \quad x_{m+1} = x_m. \quad (2.28)$$

В соответствии со сказанным относительно решения алгебраической системы (стр. 32) уравнения (2.27) записаны в виде системы дифференциальных уравнений.

Для  $Pe=5$ ,  $k=1$ ,  $m=5$  уравнение в машинных переменных примет вид:

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= 0,25x_2 + 0,625x_1 + 0,1(100 - x_1); \\ \frac{dx_2}{dt} &= 0,75x_1 - x_2 + 0,25x_3 + 0,1(100 - x_2); \\ \frac{dx_3}{dt} &= 0,75x_2 - x_3 + 0,25x_4 + 0,1(100 - x_3); \\ \frac{dx_4}{dt} &= 0,75x_3 - x_4 + 0,25x_5 + 0,1(100 - x_4); \\ \frac{dx_5}{dt} &= 0,75x_4 - 0,75x_5 + 0,1(100 - x_5). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Первое и последнее уравнения в этой системе имеют отличный от других вид из-за того, что в них введены краевые условия (2.28).

Точность решения уравнений (2.26) во многом зависит от величины критерия  $Pe$ . Уже из предварительных соображений понятно, что при малых  $Pe$  (большой коэффициент диффузии) в слое будут небольшие градиенты  $x$ . Это значит, что на одном шаге  $x$  может измениться настолько незначительно, что изменение будет сравнимо с ошибкой машины. Следовательно, вычисление производных будет производиться с большей относительной погрешностью, что приведет к большей ошибке в вычислении самой функции. Решение системы (2.29) на аналоговой машине и сравнение его с аналитическим решением позволило определить область величин  $Pe$ , в которой точность решения остается приемлемой. Оказалось, что (см. табл. 2.3) при  $Pe=2$  погрешность недопусти-

мо велика, максимальное ее значение достигает 50% (погрешности даются относительно максимального значения шкалы), однако уже при  $Re=5$  ошибка становится равной 5% и дальнейшее увеличение  $Re$  погрешности не увеличивает.

Как было сказано, точность машинного решения определялась путем сравнения его с аналитическим решением. Одновременно вычислялись невязки конечно-разностных уравнений (табл. 2.4). Величина невязок может характеризовать величину ошибки, если предположить, что вид решения меняется не сильно. Тогда, определив невязки для полного (нелинейного) уравнения, можно получить приближенные значения погрешностей его решения. Значения невязок для нелинейной задачи с

Таблица 2.3

$\xi$	$Re=2$		$Re=5$		$Re=10$	
	Р е ш е н и е					
	аналоговое	точное	аналоговое	точное	аналоговое	точное
0,0	—	26,0	—	14,6	—	83,9
0,2	51,0	35,6	27,5	27,0	23,5	23,7
0,4	66,4	43,4	39,6	39,1	36,8	36,5
0,6	79,1	49,5	49,7	48,3	49,9	47,1
0,8	88,5	53,6	58,1	55,2	57,5	55,6
1,0	92,8	55,3	64,1	58,3	65,6	60,3

$Re=5$  (табл. 2.4) позволяют считать, что, так как их величины приблизительно равны величинам невязок для линейной задачи при том же значении, то и погрешность остается той же, т. е. в пределах 5%. Кстати, интересно отметить, что невязки для  $Re=2$  (линейная задача) на порядок больше; ошибка для этого значения  $Re$  также на порядок больше.

При необходимости решать задачи с  $Re \leq 2$  можно использовать то обстоятельство, что степень неустойчивости уменьшается с уменьшением  $Re$ , тогда становится возможным использование метода проб и ошибок, причем если начальные условия, при которых выполняется правое граничное условие, находятся легко и не меняются от решения к решению, то точность получается весьма высокой. В табл. 2.5 приведены значения  $\chi$ , полученные на машине методом проб и ошибок, и точные значения решения.

Таблица 2.4

$\xi$	Линейная задача				Нелинейная задача $Re=5$
	$Re=2$	$Re=5$	$Re=10$	$Re=100$	
0,2	0,7	0,05	0,10	2,42	1,56
0,4	7,0	0,56	0,33	0,00	0,30
0,6	7,8	0,45	1,40	0,19	0,74
0,8	9,0	0,24	0,35	0,21	0,05
1,0	5,2	0,90	0,66	0,21	0,54

Методом проб и ошибок удовлетворительно решаются задачи с  $Re$  от 3 до 0,1. При малых  $Re$  решение затрудняется из-за того, что начальная производная  $\left(\frac{dx}{d\xi}\right)_{\xi=0}$ , пропорциональная  $Re\chi$  (см. граничные условия), при  $Re < 0,1$  становится сравнимой с ошибкой машины, поэтому ее поиск теряет смысл (отметим тут же, что от величины  $k$  устойчивость зависит мало).

Верхний предел  $Re$  для метода конечных разностей находится где-то около 100. Ограничением является собственно лишь значительное

уменьшение коэффициентов, стоящих перед членами  $x_{i+1}$  уравнения (2.29). Это фактически означает уменьшение влияния диффузии. Следовательно, если указанные коэффициенты становятся на два-три порядка меньше остальных, то диффузией следует пренебречь [25, 26]. Тогда уравнение (2.26) превращается в обычное дифференциальное уравнение с начальными условиями; его решение не вызывает затруднений. Сказанное подтверждает табл. 2.6, где сравниваются решения при  $Pe=100$  и  $Pe=\infty$ . Видно, что практически значения переменных уже не различаются.

Т а б л и ц а 2.5

$\xi$	$P_{\epsilon}=2$		$P_{\epsilon}=1$		$P_{\epsilon}=0,1$	
	Р е ш е н и е					
	аналоговое	точное	аналоговое	точное	аналоговое	точное
0,0	26,0	26,0	34,8	34,6	50,0	47,9
0,2	35,6	35,6	41,4	40,9	50,8	48,8
0,4	43,5	43,4	46,4	46,1	51,6	49,5
0,6	49,7	49,5	50,4	49,9	52,1	50,0
0,8	53,9	53,7	52,9	52,3	52,4	50,3
1,0	55,7	55,3	54,1	53,2	52,6	50,4

Остается теперь небольшой интервал значений  $Pe$  от 0,1 до 0, где ни один из разобранных выше методов не дает результата. Здесь можно исследовать процесс лишь при  $Pe=0$ , т. е. процесс, протекающий при идеальном перемешивании.

Рассмотрим этот случай. Уравнение для слоя с идеальным перемешиванием в плотной фазе является интегро-дифференциальным уравнением [27], решать которое также необходимо методом проб и ошибок. Оно имеет следующий вид (здесь учитывается как нелинейная кинетическая функция, так и обмен между фазами):

$$x = k \frac{1-x}{1+5,7x} + \beta x - \beta \int_0^1 y d\xi = 0, \quad (2.30)$$

$$\frac{dy}{d\xi} - a\beta(x-y) = 0.$$

Из блок-схемы уравнения (2.30) (рис. 2.16) можно понять технику решения. С помощью переменного сопротивления  $R$  устанавливается какое-то значение  $x$ , которое остается постоянным по всей длине слоя в результате идеального перемешивания. После этого, установив известное начальное условие во втором уравнении, проводим интегрирование обоих уравнений. Если после истечения заданного времени интегрирования значения переменных (интеграла  $\int_0^1 y d\xi$  и  $x$  не будут удовлетворять перво-

Т а б л и ц а 2.6

$\xi$	$Pe=100$	$Pe=\infty$
0,0	—	0
0,2	19,6	18,3
0,4	32,6	32,9
0,6	46,2	45,1
0,8	52,7	54,9
1,0	64,8	63,1

му уравнению, то нужно изменить значение  $x$  и вновь проинтегрировать систему. Обычно  $x$  находится после трех-четырёх попыток.

## Процесс внутри зерна катализатора

Остановимся вкратце еще на одном классе задач, описываемых диффузионными уравнениями. Речь идет о процессах, происходящих в порах зерна катализатора. Уравнения имеют вид (2.31), (2.32) и справедливы: первое для плоского зерна (цилиндрическая пора), второе — для сферического зерна

$$\frac{d^2x}{d\varphi^2} + A^2\omega(x) = 0, \quad (2.31)$$

$$x(1) = x_0; \left( \frac{dx}{d\rho} \right)_{\rho=0} = 0,$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 x}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dx}{d\rho} + A^2 \omega(x) &= 0, \\ x(1) = x_0; \left( \frac{dx}{d\rho} \right)_{\rho=0} &= 0. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Как можно заметить, уравнения (2.31) и (2.32) практически не отличаются от уравнений (2.25), если говорить о методах решения. Отсутствие первой производной в уравнении (2.31) и наличие переменного коэффициента в уравнении (2.32) оставляют неизменными такие свойства уравнений, как неустойчивость их решений и нелинейность (функция  $\omega(x)$ ). Коэффициент  $A^2$  также имеет тот же самый порядок величин, что и  $R\epsilon$  в уравнении (2.25), тем более, что для (2.25) разобраны самые разнообразные значения этого коэффициента. В связи со сказанным можно заключить, что для уравнений (2.31) и (2.32) применимы те же методы решения, что и для (2.25), и на них подробнее останавливаться не будем.

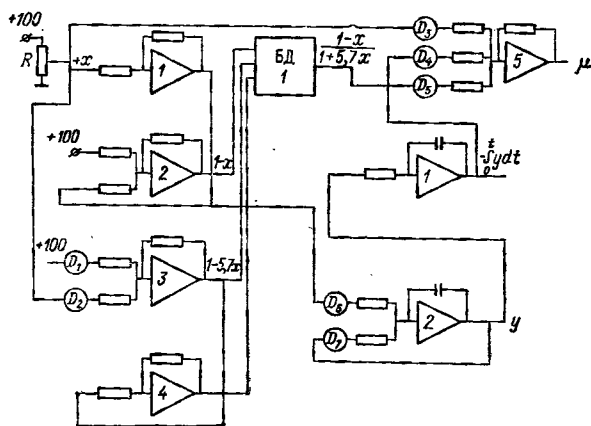


Рис. 2.16. Блок-схема псевдооживленного слоя при малых значениях  $Pe$  (уравнение 2.30).

Отметим только, что, применив разностную схему (аналогично уравнениям (2,27) и (2,28)), получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений с нелинейными правыми частями (из-за наличия нелинейной функции  $\omega(x)$ ). Поскольку число уравнений равно числу разбиений по оси, необходимо строить  $m$  вычислений функции  $\omega(x)$ , что связано с увеличением объема машины.

### Неизотермический процесс с продольным смешением

Рассмотрим возможность решения уравнений, описывающих процессы, происходящие в реакторах с неподвижным слоем катализатора при условии продольного тепло- и массопереноса (уравнения (9) из табл. 1.1). Известно, что температура в стационарном слое имеет большие градиенты и, что очень важно в данном случае, резкие изменения этих градиентов. Следовательно, заранее можно сказать, что для удов-

летворительной аппроксимации производных конечными разностями потребуется большее количество шагов, чем это было нужно для функции  $x(\xi)$ . Чтобы удостовериться в этом, рассмотрим уравнение вида

$$\begin{aligned}\frac{dT}{d\xi} &= 2,32T(1-x) - (T - T_x), \\ \frac{dx}{d\xi} &= 0,6T(1-x).\end{aligned}\quad (2.33)$$

Эти уравнения представляют собой упрощенный вариант уравнений, описывающих экзотермический процесс в стационарном слое катализатора, и функция  $T(\xi)$ , являющаяся решением (2.32), сходна по виду с этой же функцией в случае неупрощенного уравнения. Рассмотрим случай  $Pe = \infty$ , так как в противном случае трудно определить точность метода конечных разностей, что будет видно из дальнейшего. Если же  $Pe = \infty$ , то уравнение (2.33) можно решить двумя методами: первый — обычная задача Коши, причем известно, что ошибка здесь невелика, и второй — метод конечных разностей, ошибка которого неиз-

вестна. На рис. 2.17 показаны решения, полученные обоими методами. В области наибольшей кривизны функции  $T(\xi)$  разница в решениях достигает 50 %.

Оценим количество шагов, необходимое для решения такой задачи. Для этого можно подсчитать ошибку в вычислении первой производной  $T(\xi)$  конечно-разностным методом и сравнить ее с ошибкой вычисления производной на машине обычным методом. Максимальная ошибка будет, очевидно, в области наибольшей кривизны, т. е. при  $\xi = 0,4$

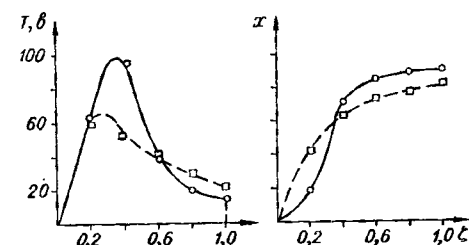


Рис. 2.17. График решения уравнения (2.33). Квадраты — конечно-разностный метод, кружки — решение начальной задачи.

(см. рис. 2.17). Для принятого здесь конечно-разностного выражения первой производной  $\frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{\Delta\xi}$  погрешность записывается как  $\Delta = \frac{(\Delta\xi)^2}{6} M_3$ ,

где  $M_3$  — максимальное значение третьей производной в рассматриваемой области.  $M_3$  можно вычислить из решения, полученного первым методом. Подставив  $M_3$ , равное здесь 34, в выражение для ошибки, получим  $\Delta \approx 0,5-1$ . Из этого следует, что для получения достаточной точности необходимо увеличить количество шагов приблизительно до пятидесяти. Это совершенно невыполнимо для задачи подобной сложности и для машины типа МН-14. Кроме того, увеличение количества шагов повлечет за собой уменьшение разностей во втором уравнении, так как функция  $x(\xi)$  остается примерно такой же по кривизне, как и в уравнении (2.24). В результате этого разности, аппроксимирующие производные  $\frac{dx}{d\xi}$ , могут стать меньше ошибок, что приведет к абсурду в вычислениях  $x$ .

### Нестационарные процессы в псевдоожиженном слое катализатора

Несмотря на то, что стационарные уравнения для псевдоожиженного слоя решаются как нестационарные, если используется метод конечных разностей, и при этом получаются удовлетворительные резуль-

таты, моделирование нестационарных процессов встречает свои трудности, которые, видимо, в большинстве случаев так же, как и для неизо термического слоя, делают невозможным решение с помощью обычных аналоговых машин. Необходимость моделирования нестационарных процессов возникает не только при автоматическом регулировании, но и при изучении гидродинамических свойств псевдоожиженного слоя катализатора методом трассирующего газа. В слое при этом химической реакции не происходит — на вход слоя подается инертный газ, концентрация которого меняется во времени по известному закону (известная входная функция). На выходе с помощью некоего детектора снимается выходной сигнал. Изменение формы выходного сигнала относительно входного является источником информации о происходящих в слое явлениях. Уравнения, описывающие этот процесс, подобны уравнениям (2.25), но в них нет члена, включающего химическую реакцию.

Естественно, лучше всего исследование гидродинамических свойств слоя проводить с помощью моделирования физического объекта целиком и поиска на модели неизвестных параметров, в частности  $Pe$  и  $\beta$  (см. (2.25)). Предполагается, что уравнение верно описывает объект. Выпишем нестационарные уравнения псевдоожиженного слоя без химической реакции. Как и ранее, рассматривается двухфазная модель

$$\begin{aligned}\varepsilon \frac{\partial x}{\partial t} &= \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x}{\partial \xi} - \beta(x - y), \\ \frac{\partial y}{\partial t} &= - \frac{\partial y}{\partial \xi} + \alpha \beta(x - y)\end{aligned}\quad (2.34)$$

( $\varepsilon$  — порозность слоя). Краевые и начальные условия:

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial x}{\partial \xi} \right|_{\xi=0} &= Pe x(0, t), \quad \left. \frac{\partial x}{\partial \xi} \right|_{\xi=1} = 0, \\ x(\xi, 0) &= 1, \quad y(\xi, 0) = 1.\end{aligned}$$

Если иметь в виду методы решения, то уравнения (2.25) и (2.34) отличаются друг от друга лишь наличием в (2.24) нелинейного члена, который только усложняет задачу. Однако вся суть в том, что для (2.34) нужно иметь в результате решения не только установившиеся значения концентраций  $x_k$  и  $y_k$ , но и их изменение во времени. Для определения погрешностей решения (2.34) вновь будем сравнивать аналитическое и машинное решения. Получить аналитическое решение (2.34) можно, если положить  $\beta=0$ . Тогда модель становится однофазной, что в принципе не изменит погрешностей при решении. Следовательно, будет решаться уравнение

$$\varepsilon \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x}{\partial \xi}. \quad (2.35)$$

Краевые и начальные условия прежние.

Решить уравнение (2.35) можно методом разделения переменных. Для этого сделаем вначале замену переменных

$$x = e^{\mu \varepsilon + \rho t} u,$$

где

$$\mu = \frac{Pe}{2}, \quad \rho = - \frac{Pe}{4\varepsilon}.$$

Тогда получим

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon Pe} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2}$$



с краевыми и начальными условиями

$$\frac{1}{Pe} \left( \frac{\partial u}{\partial \xi} \right)_{\xi=0} + \frac{1}{2} u(0, t) = 0,$$

$$\frac{1}{Pe} \left( \frac{\partial u}{\partial \xi} \right)_{\xi=1} - \frac{1}{2} u(1, t) = 0,$$

$$u(\xi, 0) = e^{-\frac{Pe}{2}\xi}.$$

Представив  $u(\xi, t)$  как  $X(\xi)T(t)$  и разделяя переменные, получим

$$\frac{x''}{x} = \epsilon Pe \frac{T'}{T} = -\lambda.$$

Опустив из-за громоздкости промежуточные расчеты, запишем окончательный результат:

$$u(\xi, t) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\left( \lambda_n^2 - \frac{Pe^2}{4} \right) e^{-\frac{Pe}{2}\xi} \sin \lambda_n \xi + \lambda_n Pe e^{-\frac{\lambda_n^2}{\epsilon Pe} t}}{\frac{Pe^2}{4} + \lambda_n^2} \times \\ \times \frac{\lambda_n \cos \lambda_n \xi + \frac{Pe}{2} \sin \lambda_n \xi}{\lambda_n^2 + \frac{Pe}{2} \left( \frac{Pe}{2} + 2 \right)}, \quad (2.36)$$

где  $\lambda_n$  — положительные корни уравнения,

$$2 \operatorname{ctg} \lambda = \frac{2\lambda}{Pe} - \frac{Pe}{2\lambda},$$

или для  $x(\xi, t)$

$$x(\xi, t) = e^{-\frac{Pe}{2}\xi - \frac{Pe}{4\epsilon}t} u(\xi, t). \quad (2.37)$$

В численном виде решение легко получить, вычислив ряд (2.37) на цифровой машине. Достаточная для наших целей точность получается уже при суммировании двадцати членов ряда.

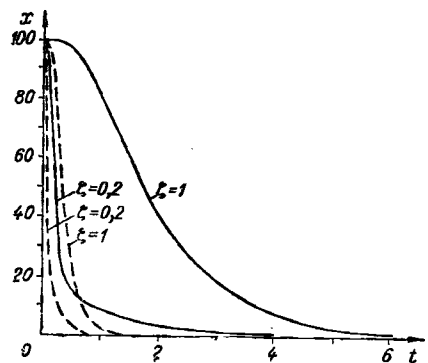
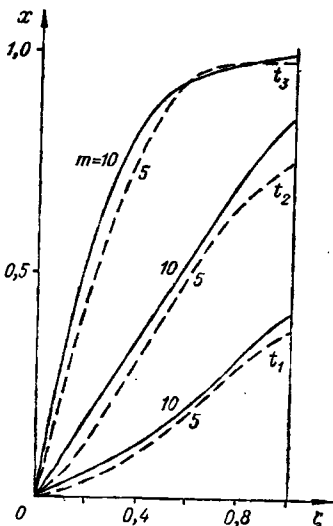


Рис. 2.19. Сравнение решений уравнения (2.35) на аналоговой машине (сплошные линии) и аналитического (пунктир).

Рис. 2.18. График решения уравнения (2.35) при различном числе шагов  $m$  в различные моменты времени.

Решения на аналоговой машине проводились конечно-разностным методом, подобным описанному, причем для грубой оценки влияния количества шагов на решение область  $\xi$  разбивалась на 5 и 10 участков. Выяснилось, что удвоение количества шагов не приводит к существенному изменению решения (рис. 2.18). В то же время сравнение с аналитическим решением показало чрезвычайно большое отклонение машинного решения от аналитического (рис. 2.19).

Конечно, здесь взята самая неприятная входная функция  $F(t)$ , а именно, скачок; более гладкая функция даст меньшую погрешность. Но, во-первых, определение погрешности для функции любого вида затруднительно, во-вторых, и это основное, в эксперименте выгодно брать как можно более крутой входной сигнал. Поскольку же увеличение числа шагов от 5 до 10 не дало результата, для получения достаточной точности нужно либо существенное увеличение числа шагов, либо столь же существенное сглаживание входной функции. Ни то, ни другое в нашем случае не может быть сделано.

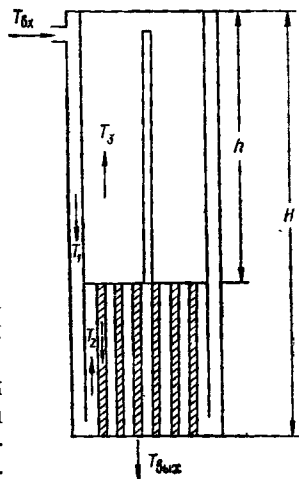
В дополнение заметим, что решение уравнения (2.34) на цифровой машине типа М-20 занимает 20 мин, что, учитывая необходимость поиска двух неизвестных параметров, ведет к недопустимо долгому решению.

### Реакторы с внутренним теплообменом. Термический крекинг

Особый вид краевых задач встречается при моделировании автотермических реакторов, где подогрев исходной смеси производится за счет тепла реакции. В этом случае газ, прежде чем попасть в реакционную зону, проходит снаружи ее и нагревается в результате теплообмена. Простейший случай такого реактора, когда имеется только два противоположно направленных потока, описывается уравнениями (4) (табл. 1.1).

Рассмотрим вначале задачу более сложную, включающую несколько потоков газа, а именно, реактор термического крекинга, (рис. 2.20). Газ с температурой  $T$  входит в кольцевое пространство. Здесь происходит теплообмен с более горячей внутренней зоной реактора (параметр теплообмена  $B_1$ ) и с холодной внешней средой ( $B_{тп}$ ). Нагревшись до температуры  $T_n$  реагирующий газ входит в межтрубное пространство, в котором поток имеет противоположное направление. Здесь идет теплообмен с кольцевым пространством (охлаждение) и трубным (нагревание). Кроме того, в результате повышения температуры начинается выделение тепла за счет начавшейся реакции деалкилирования. Основная часть превращения происходит в зоне реактора, условно называемой адиабатической; в этой зоне теплообмен идет только с кольцевым пространством. После адиабатической зоны газ, вновь изменив направление движения, проходит через трубчатую часть аппарата (температура —  $T_4$ ), где он отдает часть своего тепла газу, находящемуся в межтрубном пространстве.

Уравнения, описывающие термический реактор крекинга, следующие:



$$\left. \begin{aligned}
 \frac{dT_1}{dl} &= B_1(T_2 - T_1) - B_{\text{тп}}(T_1 - T_x), \\
 \frac{dT_2}{dl} &= B_2(T_4 - T_2) - B_1(T_2 - T_1) + \Delta T_{\text{ах}} \frac{dx_2}{dl}, \\
 \frac{dT_3}{dl} &= \Delta T_{\text{ах}} \frac{dx_3}{dl} - B_1(T_3 - T_1), \\
 \frac{dT_4}{dl} &= \Delta T_{\text{ах}} \frac{dx_4}{dl} - B_2(T_4 - T_2), \\
 \frac{dx_2}{dl} &= k(T) \frac{1-x_2}{1+ax_2} \cdot \frac{F_{\text{межтр}}}{V}, \\
 \frac{dx_3}{dl} &= k(T) \frac{1-x_3}{1+ax_3} \cdot \frac{F_{\text{ах}}}{V}, \\
 \frac{dx_4}{dl} &= k(T) \frac{1-x_4}{1+ax_4} \cdot \frac{F_{\text{тр}}}{V},
 \end{aligned} \right\} \quad (2.38)$$

где  $x$  — степень превращения;  
 $F$  — площадь соответствующего сечения реактора;  
 $V$  — нагрузка на реактор по реакционной смеси;  
 $T_1$  — температура в кольцевом пространстве;  
 $T_x$  — температура наружной среды ( $T_x = 10^\circ \text{C}$ );  
 $T_2$  — температура межтрубного пространства;  
 $T_3$  — температура в адиабатической зоне реактора;  
 $T_4$  — температура в трубчатой части аппарата;  
 $B_{\text{тп}}$  — параметр теплопотерь;  
 $B_1$  — параметр теплообмена между кольцевым и межтрубным пространством;  
 $B_2$  — то же, между трубчатой частью и межтрубным пространством;  
 $\Delta T_{\text{ах}}$  — адиабатический разогрев реакционной смеси;  
 $k(T)$  — константа скорости реакции, равная  $k_0 e^{\frac{21200}{RT}}$ .

Граничные условия уравнения и ограничения, накладываемые на переменные:

$$400^\circ \text{C} \leq T \leq 520^\circ \text{C}; \quad T_2, T_3, T_4 \leq 720^\circ \text{C};$$

$$T_1(0) = T_{\text{вх}}; \quad T_3(0) = T_4(h) = 720^\circ \text{C};$$

$$T_2(H) = T_1(H); \quad T_2(h) = T_3(h);$$

$$x_2(H) = 0; \quad x_3(0) = x_4(h); \quad x_2(h) = x_3(h).$$

Уравнения (2.38) имеют некоторые особенности, а именно, переменная  $l$  в различных уравнениях изменяется не в одних и тех же пределах, что следует из схемы реактора. Так, в первом уравнении  $l$  меняется от 0 до  $H$  (полная длина реактора), во втором и четвертом — от  $h$  до  $H$  ( $h$  — длина адиабатической зоны) и в третьем — от 0 до  $h$ . В уравнении для  $x$   $l$  изменяется соответственно 2, 3 и 4-му уравнениям.

Направление движения газа в зонах, описываемых 2 и 3-м уравнениями, противоположно направлению в зонах, описываемых 1 и 4-м уравнениями.

Эти особенности обуславливают некоторую специфику моделирования такого реактора на аналоговой машине. Рассмотрим, во-первых, вопрос о выборе начала решения. В системе (2.38) направление оси независимой переменной для каждого уравнения совпадает с направлением движения газа. В машине же независимой переменной является время, и изменяться оно может, естественно, лишь в одном направлении. Поэтому в некоторых уравнениях в зависимости от выбора начала

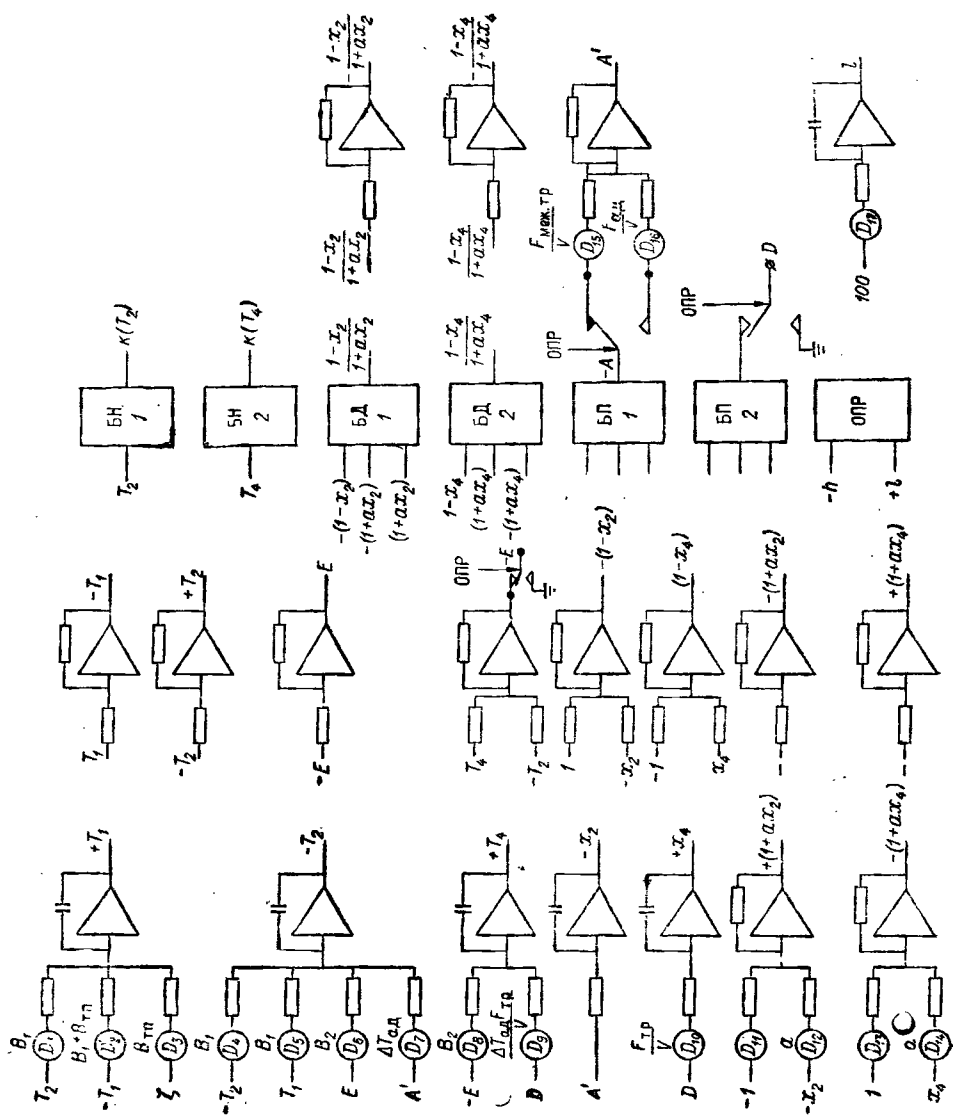


Рис. 2.21. Блок-схема модели реактора термического крекинга (уравнение (2.39)).

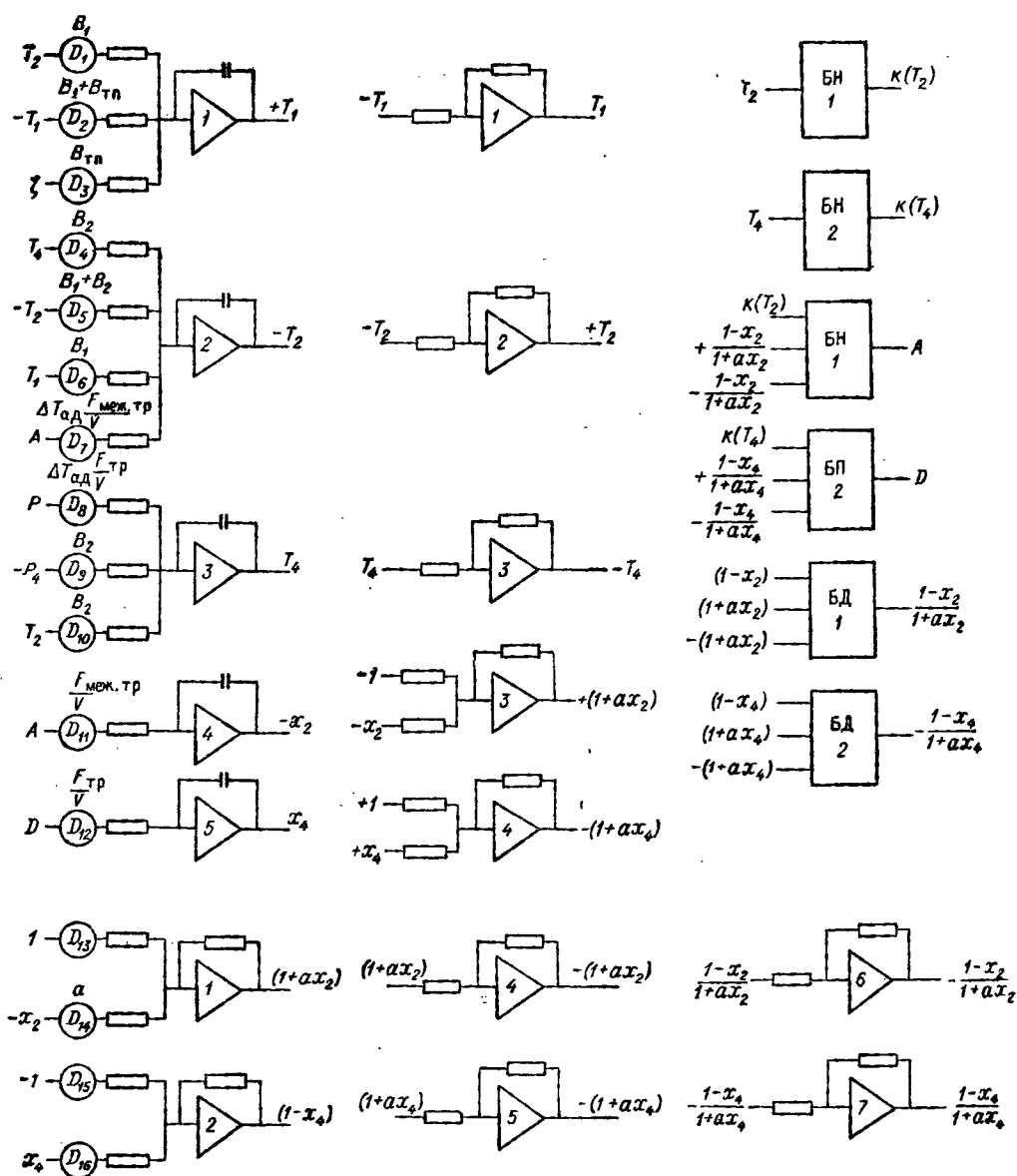
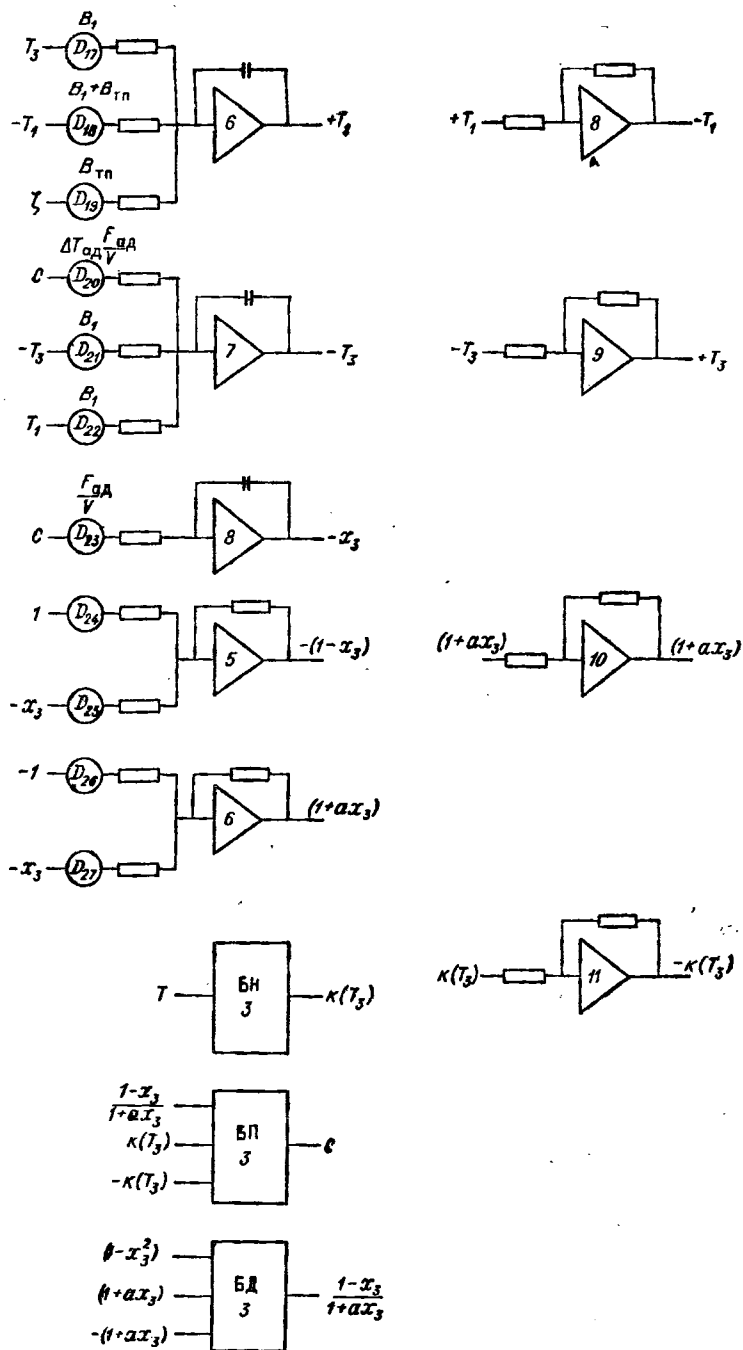


Рис. 2.22. Блок-схема модели реактора



термического крекинга (уравнение (2.38)).

решения необходимо изменить знак независимой переменной, а следовательно, и знак первой производной по этой переменной. Изменение знака влечет за собой нарушение устойчивости решений соответствующих уравнений; в них появится член вида  $e^{nl}$ . Начало решения нужно выбирать так, чтобы возникшая неустойчивость была наименьшей.

Рассмотрим уравнения (2.38) с этой точки зрения. Величины коэффициентов теплопередачи для этого аппарата следующие:  $B_{тп}=0,006$ ,  $B_1=1,05$ ,  $B_2=1,57$ . Из этого следует, что решение второго уравнения наименее устойчиво, так как в нем присутствуют как  $B_1$ , так и  $B_2$ , имеющие большую величину по сравнению с  $B_{тп}$ . Решения остальных уравнений имеют приблизительно одинаковую степень неустойчивости.

Во-вторых, необходимость проводить решение с одного конца требует подбора граничных условий на этом конце с тем, чтобы граничные условия на втором конце реактора были выполнены. С этой точки зрения выбор начала решения безразличен, так как количество подбираемых величин в том и другом случае одно и то же. Исходя из сказанного, следует начинать решение с нижней части реактора, чем обеспечивается устойчивость решения второго уравнения.

В-третьих, разные пределы изменения  $l$  означают, что система уравнений (2.38) является системой с переменными коэффициентами, зависимость которых от  $l$  следующая:

$$B_2 = \begin{cases} B_2 & \text{при } H > l > h, \\ 0 & \text{при } h > l > 0, \end{cases} \quad F = \begin{cases} F_{\text{мектр}} & \text{при } H > l > h, \\ F_{\text{ад}} & \text{при } h > l > 0, \end{cases}$$

$$F_{\text{тр}} = \begin{cases} F_{\text{тр}} & \text{при } H > l > h, \\ 0 & \text{при } h > l > 0, \end{cases}$$

$B_1$ ,  $B_{тп}$  и  $\Delta T_{\text{ад}}$  — постоянные.

При такой записи вид системы (2.38) становится несколько другим, из нее исчезают третье и шестое уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{dT_1}{dl} &= B_1(T_2 - T_1) - B_{тп}(T_1 - T_x), \\ \frac{dT_2}{dl} &= B_2(T_4 - T_2) - B_1(T_2 - T_1) + \Delta T_{\text{ад}} \frac{dx_2}{dl}, \\ \frac{dT_4}{dl} &= \Delta T_{\text{ад}} \frac{dx_4}{dl} - B_2(T_4 - T_2), \\ \frac{dx_2}{dl} &= k(T) \frac{1 - x_2}{1 + ax_2} \cdot \frac{F}{V}, \\ \frac{dx_4}{dl} &= k(T) \frac{1 - x_4}{1 + ax_4} \cdot \frac{F_{\text{тр}}}{V}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Получить решение системы (2.39) можно, используя, например, имеющиеся в МН-14 блоки условного перехода. Блок-схема системы (2.39) приведена на рис. 2.21. На рис. 2.23 показаны нелинейности этой задачи. Однако моделировать рассматриваемый реактор в таком виде несколько неудобно, так как необходимо заранее задавать величину  $h$ , которая определяется, вообще говоря, из решения. Избежать этого можно, решая прямо систему (2.38), что приведет к некоторому усложнению блок-схемы, но даст заметный выигрыш во времени. Блок-схема системы (2.38) состоит из двух частей (рис. 2.22). Пуск их может осуществляться независимо друг от друга. В первой части блок-схемы моделируются 1, 2, 4, 5 и 7-е уравнения, в которых переменная  $l$  изменяется от  $H$  до  $h$  (при решении снизу реактора). Во второй части моделиру-

ются уравнения: 1-е (где  $T_2$  заменено на  $T_3$ ), 3 и 6-е, причем конечные значения соответствующих переменных в первой части блок-схемы являются начальными значениями во второй. Здесь переменная  $l$  изменяется от  $h$  до 0. Таким образом,  $h$  удастся определить непосредственно в процессе решения, наблюдая, например, за величиной  $T_4$ , которая не должна превышать 100 °C (в машинных переменных).

Процесс решения заключается в следующем: задается некоторое значение  $T_2(H) = T_1(H)$ ,  $x_k$  и  $T_4(H)$  и включается первая часть блок-схемы. Решение продолжается до тех пор, пока  $T_4$  не достигнет 100 °C. После этого включается вторая часть схемы, где  $T_2(h) = T_3(h)$ ,  $x_2(h) = x_3(h)$ . Здесь решение продолжается до достижения  $T_3$  также 100 °C или  $T_1 = -100$  °C (400 °C). Решение будет удовлетворять крайним условиям, если по его окончании  $T_1 \geq 400$  °C,  $T_3 = T_4(h)$ ,  $x_3 = x_4(h)$ .

Иллюстрацией к сказанному является рис. 2.23, где показан один из режимов описанного аппарата, найденный на машине МН-14.

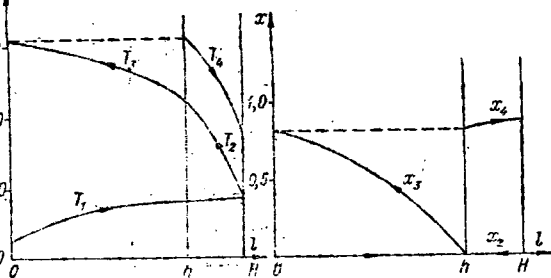


Рис. 2.23. Распределение температуры и степени превращения в реакторе термического крекинга.

## Синтез высших спиртов

При моделировании процесса синтеза высших спиртов в реакторе с внутренним теплообменом возникают иные проблемы по сравнению с предыдущим случаем. Реактор синтеза высших спиртов проще, в нем лишь два прогнвсположно направленных потока газа. Отличие от предыдущего процесса заключается в значительно меньшей степени превращения. Кроме того, некоторые режимы работы реактора могут оказаться неустойчивыми. Рассмотрим подробнее работу исследуемого реактора.

Свежая реакционная смесь входит в трубки контактного аппарата (рис. 2.24) с температурой  $T_0$ , где нагревается за счет тепла реакции.

По выходе из трубок смесь с температурой  $T_n$  направляется в межтрубное пространство, заполненное катализатором. Выделяющееся в результате реакции тепло частично идет на нагрев исходной газовой смеси. Прореагировавшая смесь выходит из аппарата при температуре  $T_k$ .

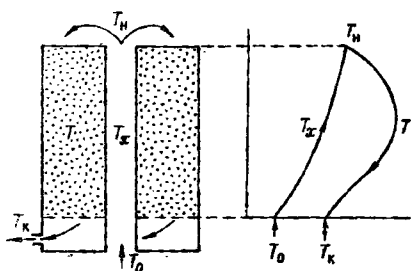


Рис. 2.24. Схема реактора синтеза высших спиртов.

При малой степени превращения исходных веществ скорость процесса определяется только температурой и практически не зависит от степени превращения.

В этом случае математическая модель процесса в аппарате с внутренним теплообменом описывается следующей системой дифференциальных уравнений [28]:

$$\frac{dT}{d\tau} = \Delta T_{\text{ак}} k - B(T - \theta), \quad (2.40)$$

$$\frac{d\theta}{d\tau} = -B(T - \theta), \quad \frac{dx}{d\tau} = k.$$





2. Существует максимальное значение  $T_0$ , выше которого нет стационарного распределения температур, не имеется решения системы (2.40).

В работах [29], [30] показана неустойчивость одного из режимов. Таким образом, можно получить неустойчивые режимы работы реактора с внутренним теплообменом, что, вообще говоря, является необычным. Но дело в том, что моделировалась пространственная картина работы аппарата, неустойчивость же является временной.

Это обстоятельство также указывает на то, что при моделировании аппаратов с внутренним теплообменом надо определить все стационарные режимы и исследовать их на устойчивость. В противном случае можно получить решение системы (2.40) — (2.40б), но найденный режим не может быть реализован, если полученное стационарное распределение температур и концентраций будет неустойчивым.

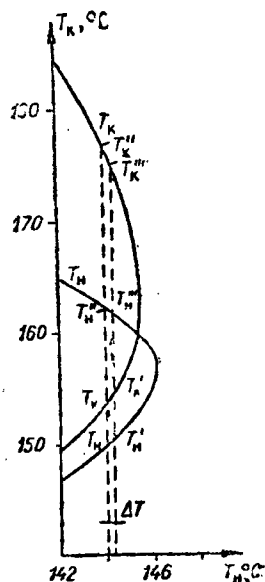


Рис. 2.27. Зависимость  $T_K$  и  $T_N$  от  $T_0$  для реактора синтеза высших спиртов.

## ЛИТЕРАТУРА К ГЛАВЕ II

1. И. И. Этерман. Математические машины непрерывного действия. М., Машгиз, 1957.
2. У. Карплюс. Моделирование устройства для решения задач теории поля. М., ИЛ, 1962.
3. Б. Я. Коган. Электронные моделирующие устройства и их применение для исследования систем автоматического регулирования. М., Физматгиз, 1963.
4. В. Б. Ушаков и др. Электронная нелинейная аналоговая машина МН-14. М., «Машиностроение», 1964.
5. T. I. Williams. — Ind. Eng. Chem., **50**, 1631 (1958).
6. Г. К. Боресков, Р. А. Буянов, А. А. Иванов. Кинетика и катализ, **8**, 153 (1967).
7. М. И. Темкин, В. М. Пыжов. — ЖФХ, **13**, 351 (1939).
8. I. A. Beuler. — Chem. Eng. Progr., **52**, 69 (1956).
9. Н. С. Заярный. — Сб. «Моделирование и оптимизация каталитических процессов». М., «Наука», 1965, стр. 171.
10. C. van Heerden. — Chem. Eng. Sci., **8**, 133 (1958).
11. М. Г. Слинько. — Кинетика и катализ, **1**, 153 (1960).
12. В. С. Бесков, В. А. Кузин, М. Г. Слинько. — Хим. пром., № 7, 508, (1964).
13. Н. И. Шамяко. — Сб. «Всесоюзная конференция по химическим реакторам». Новосибирск, СО АН СССР, 1965, стр. 467.
14. И. М. Витенберг. — Сб. «Аналоговые методы и средства решения краевых задач». Киев, «Наукова думка», 1964, стр. 294.
15. Н. Н. Боголюбов, Ю. А. Митропольский. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М., Физматгиз, 1958.
16. А. И. Гельбштейн и др. — Нефтехимия, **4**, 909 (1964); **5**, 118 (1965).
17. Г. М. Островский и др. — Хим. пром., № 1, 31 (1965).
18. Ю. И. Ермаков и др. — Кинетика и катализ, **6**, 909 (1965).
19. Ю. И. Ермаков, В. Б. Скоморохов, О. А. Малиновская. — Сб. «Всесоюзная конференция по химическим реакторам». Новосибирск, СО АН СССР, 1965, стр. 203.
20. Ю. Ш. Матрос, В. С. Бесков. — Хим. пром., № 12, 883 (1963).

21. А. И. Куриленко и др. — ЖФХ, 32, 1043 (1958).
  22. А. И. Куриленко и др. — Кинетика и катализ, 3, №8 (1962).
  23. Ю. С. Кабанов и др. — Сб. «Всесоюзная конференция по химическим реакторам». Новосибирск, СО АН СССР, 1965, стр. 54.
  24. В. С. Бесков и др. Там же, стр. 670.
  25. В. С. Бесков, В. А. Кузин, М. Г. Слиньюко. — Хим. пром., № 1, 4 (1965).
  26. В. С. Бесков. — Сб. «Моделирование и оптимизация каталитических процессов». М., «Наука», 1965, стр. 59.
  27. W. K. Lewis etc. — A. I. Ch. E. Journal, 5, 419 (1959).
  28. Ю. Б. Коган и др. — Сб. «Моделирование и оптимизация каталитических процессов». М., «Наука», 1965, стр. 155.
  29. М. Г. Слиньюко, В. С. Бесков, В. Б. Скоморохов. — Хим. пром., № 9, 641 (1964).
  30. R. F. Baddour, P. L. Brian, B. A. Lodlais, I. P. Eymery. — Chem. Eng. Sci., 20, 281 (1965).
-

## ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА НА ЦИФРОВЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МАШИНАХ

### § 1. КЛАССИФИКАЦИЯ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ

Химические процессы в слое катализатора описываются системами из различных видов дифференциальных уравнений — в обыкновенных и частных производных первого и второго порядка с различными типами граничных условий.

При всем многообразии возникающих задач для их расчета на ЭВМ естественно стремиться к созданию общего подхода, к использованию численных методов, применение которых не зависит от числа уравнений, входящих в математическое описание, встречающихся видов граничных условий, кинетических закономерностей процесса, знания приближенного решения.

Кроме того, преследуются программистские цели: простота осуществления алгоритма на вычислительной машине, ограниченный объем перерабатываемой информации, быстрая сходимость и т. п.

Как было сказано в гл. I, наиболее типичные уравнения математического описания каталитических процессов разбиты на ряд групп (табл. 1.1). В этой таблице дана классификация уравнений как на основе использованных моделей процесса (идеальное вытеснение, идеальное смешение и т. д.), так и по виду уравнений с точки зрения их решения на цифровых вычислительных машинах (ЦВМ). Первая группа уравнений — системы обыкновенных дифференциальных уравнений с начальными условиями (задача Коши). Методы решения их довольно хорошо разработаны (например, широко применяемый метод Рунге-Кутты). Типовые или стандартные программы для них входят в математическое обеспечение всех современных ЦВМ, и потому на решении этих задач останавливаться здесь не будем. Отметим только следующее. Уравнения, описывающие процесс в слое идеального смешения (1), также включены в эту группу, хотя они и являются алгебраическими уравнениями. Но решение этих трансцендентных уравнений — задача довольно сложная, поскольку приходится, как правило, применять методы поиска решения путем упорядоченного или последовательного перебора возможных значений искомых переменных. Путем перехода к нестационарной задаче такого вида

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{C - C_0}{\tau_k} &= W(C, T), \\ \beta \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{T - T_0}{\tau_k} &= \frac{Q_0}{c_p} W_0(C, T), \\ t = 0: C &= C_n, T = T_n \end{aligned}$$

можно получить достаточно просто нужное решение стационарной задачи при  $t$  достаточно большом. При этом независимо от числа и вида уравнений решение получается по единообразному алгоритму. Естественно, решением нестационарной задачи нельзя получить неустойчивые стационарные состояния, которые возможны в слое идеального смешения [1]. Поскольку стационарных состояний может быть одно или два (для простой реакции), выйти на них можно путем соответствующего подбора начальных условий  $C_n$  и  $T_n$ . Кроме того, во избежание появления колебательных режимов [2] иногда необходимо ввести коэффициент  $\beta$ . Физически это означает учет тепловой емкости катализатора, вследствие чего неустойчивые режимы колебательного характера исчезают. Значение коэффициента  $\beta$  лежит обычно в пределах от нескольких десятков до нескольких сотен единиц.

Вторая группа уравнений — системы обыкновенных дифференциальных уравнений с краевыми условиями, заданными на разных границах слоя (уравнения (4) из табл. 1.1). Вообще говоря, решать эти уравнения также возможно, как начальные задачи, подбирая ряд условий на одной границе, чтобы в результате решения выполнить заданные условия на другой границе. Но подбор краевых условий связан с большим числом решений одной задачи и потому не всегда эффективен. Кроме того, подбор условий на одной границе зависит от вида уравнений, и потому, вообще говоря, для каждой задачи необходимо подбирать свой алгоритм решения. Путем перехода к решению нестационарной задачи удастся разработать единый алгоритм для всех уравнений этой группы.

Третья группа уравнений — дифференциальные уравнения второго порядка в обыкновенных и частных производных (уравнения (6) — (9) из табл. 1.1). Краевые условия в обыкновенных уравнениях заданы на разных границах, и решать эти задачи, как начальные, вообще говоря, некорректно (см. гл. II). Путем перехода к нестационарным задачам уравнения в обыкновенных производных преобразуются в уравнения в частных производных, и таким образом удастся для всей третьей группы уравнений найти общие подходы к их численному решению.

Так же, путем перехода к нестационарной задаче, решаются смешанные уравнения — четвертая группа (уравнения (5) из табл. 1.1).

Наиболее сложными для численного решения являются системы уравнений общего вида — (10) — (11) из табл. 1.1. Хотя и здесь задача краевая, но переход к нестационарной задаче также позволяет разработать довольно удобный метод решения.

В общем виде методами решения всех задач являются сеточные или, как их иначе называют, конечно-разностные методы [3]. Для разных групп задач используются различные модификации этих методов.

Решение нестационарных задач, кроме простого способа решения стационарных задач, дает возможность рассчитывать переходные режимы и влияние различного рода возмущений на течение процесса. Одновременно создается общий подход к решению самых разнообразных задач.

## § 2. ОПИСАНИЕ И АНАЛИЗ АЛГОРИТМОВ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

### Сеточный или конечно-разностный метод

Все встречающиеся системы уравнений можно представить в виде

$$\frac{\partial U_l}{\partial t} = A_l U_l + f_l(U_1, \dots, U_m), \quad (3.1)$$

$$l = 1, 2, \dots, m,$$

где  $A_i$  — линейный дифференциальный оператор;

$f_i$  — нелинейная функция, в которую входит выражение для кинетики протекающих реакций.

Разобьем область изменения независимых переменных сеткой (на рис. 3.1 показана двумерная сетка, узлы которой аппроксимируют решение задачи). Основная задача состоит в получении приближенного решения в момент времени  $t + \Delta t$  ( $\Delta t$  — «шаг» сетки по времени или по координате, играющей роль времени, как, например, длина слоя в задаче (7) — (8) из табл. 1.1). Предполагается, что значения искомого функций в момент  $t$  (и раньше) известны. Практика расчетов показывает, что достаточно хорошо «работают» двухслойные схемы, когда для решения задачи в момент времени  $t + \Delta t$  используются значения функций только в момент времени  $t$  (на предыдущем «временном слое»). Ниже поясним, как на основе дифференциальных уравнений строится конечно-разностное.

Как правило, для расчетов применялась неявная разностная схема (см. рис. 3.1)

$$\frac{(U_i)^{k+1} - (U_i)^k}{\Delta t} = A_i((U_i)^{k+1} + f_i((U_1)^k, \dots, (U_m)^k)),$$

где  $(U_i)^k$  — приближенное значение искомой функции в точке  $(x_i, t_k) = (i \cdot h, k \cdot \Delta t)$ ;

$A_i$  — разностный оператор, аппроксимирующий дифференциальный оператор  $A_i$ ;

$k, i$  — нумерация узлов сетки по времени и другим координатам;

$\Delta t, h$  — «шаг» сетки по времени и другим координатам.

Отсюда видно, что разностный оператор берется на  $(k+1)$ -ом слое, а нелинейный член  $f_i$  выносится на уже просчитанный временный слой. В результате получается  $m$  независимых систем линейных алгебраических уравнений, которые успешно решаются с помощью метода прогонки [4], если исходное уравнение диффузионного типа, или методом бегущего счета для уравнений типа переноса [5].

Если оператор  $A_i$  взять на  $k$ -ом слое, то получится явная схема (см. рис. 3.1), более простая по осуществлению, но условно устойчивая в том смысле, что возможность ее применения зависит от соотношения шагов  $\Delta t$  и  $h$ . В результате ограничений на шаг по временной координате время счета по явной схеме иногда увеличивается в десятки и даже сотни раз. Предлагаемые алгоритмы можно рассматривать как итерационные процессы, где верхний индекс означает номер итерации, а  $\Delta t$  — релаксационный параметр, определяющий скорость сходимости итераций.

Так решение задачи внутренней диффузии на зерне катализатора для процесса окисления двуокиси серы при реальных значениях параметров проводилось по явной и неявной схеме с  $h=1/16$  (радиус зерна принят за единицу). По явной схеме для достижения стационарного состояния с точностью  $10^{-4}$  потребовалось примерно в сто раз больше итераций, чем по неявной. При уменьшении  $h$  разрыв в числе итераций растет, как  $1/h^2$ . Преимущество неявных схем очевидно. Применение схем повышенной точности по временной координате (например, метода прямых с дальнейшим использованием метода Рун-

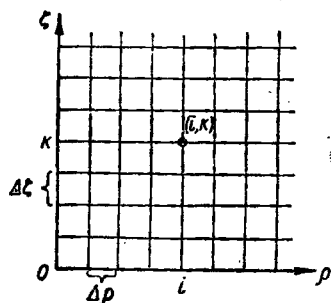


Рис. 3.1. Схема сетки.

ге-Кутта) целесообразно только при расчете переходного процесса. Если основной задачей является расчет стационарного режима и точного значения переходных процессов не требуется, то использование устойчивого итерационного процесса для неявных схем имеет преимущество — быструю сходимость процесса решения.

Если в системе уравнений (3.1)  $A_l$  зависит от нескольких пространственных переменных, то применение одного из методов переменных направлений [6, 7, 8, 9] сводит исходную задачу к последовательному решению одномерных уравнений.

Конечно, при конкретных расчетах можно совершенствовать численные методы, используя специфику уравнений или привлекая специальные способы. Сейчас известны для ряда задач более экономичные методы их решения. Например, для задач второго типа по табл. 1.1 [10] или третьего типа [11]. Но этот метод требует специального подхода к задаче при разработке алгоритма решения. Здесь речь идет о создании общего подхода к решению задач определенного класса.

### Выбор сетки, аппроксимация, алгоритмы счета

Рассмотрим системы уравнений второго порядка параболического типа

$$\frac{\partial U_l}{\partial t} = F_l\left(x, U, \frac{\partial U_l}{\partial x}, \frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2}\right) + J_l(U_1, \dots, U_m) \quad (3.2)$$

с граничными и начальными условиями

$$G_l\left(U_l, \frac{\partial U_l}{\partial x}\right)_{x=0} = 0; \quad G_l^*\left(U_l, \frac{\partial U_l}{\partial x}\right)_{x=1} = 0; \quad U_l|_{t=0} = U_{l0},$$

где  $\{F_l, G_l, G_l^*\}$  — линейные функции относительно  $U_l$  и ее производных;

$J_l$  — нелинейная функция, обычно соответствующая кинетическому члену уравнения, причем

$$\sum_{j=1}^m \left| \frac{\partial f_l}{\partial U_j} \right| < C \quad (l = 1, \dots, m).$$

Решение задачи (3.2) —  $U = (U_1, \dots, U_m)$  — ищется в области  $D[0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq T]$ . Предполагается существование у него ограниченных вторых производных по временной координате и четвертых — по пространственной.

Пусть  $\tau$  и  $h$  — приращения независимых переменных  $t$  и  $x$ . Множество точек плоскости с координатами  $x = ih, t = k\tau$  ( $i = 0, 1, \dots, n; k = 0, 1, 2, \dots, [T/\tau]$ ) образует простейшую прямоугольную сетку. Для задач с симметрией по  $x$  относительно начала координат используется несколько иное разбиение области  $D$ :

$$x = \left(i - \frac{1}{2}\right)h, \quad t = k\tau \quad \left(i = 0, 1, \dots, n; k = 0, 1, \dots, \left[\frac{T}{\tau}\right]\right),$$

где  $\left(n - \frac{1}{2}\right)h = 1$ . Если приближенные значения  $U_l(ih, k\tau)$  обозначить через  $(U_l)_i^k$  и для аппроксимации производных, входящих в уравнение (3.2), применить разностные отношения:

$$\frac{\partial U}{\partial t} \Big|_{(x_i, t_k)} \approx \frac{U_i^{k+1} - U_i^k}{\tau} = \Delta_t U_i^k,$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x_i, t_k} \approx \frac{U_{i+1}^k - U_{i-1}^k}{2h} = \Delta_x U_i^k,$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Big|_{x_i, t_k} \approx \frac{U_{i+1}^k - 2U_i^k + U_{i-1}^k}{h^2} = \Delta_x^2 U_i^k,$$

то задача численного интегрирования уравнений (3.2) может быть реализована с помощью явной разностной схемы

$$\begin{aligned} \frac{(U)_i^{k+1} - (U)_i^k}{\tau} &= F_i(x_i, (U)_i^k, \Delta_x (U)_i^k, \Delta_x^2 (U)_i^k) + \\ &+ f_i((U)_1^k, \dots, (U)_m^k) \end{aligned} \quad (3.3)$$

( $i = 1, \dots, n-1$ ;  $l = 1, \dots, m$ ).

Другой тип сеточных уравнений — неявная схема — получится при замене производных по пространственной переменной отношениями на  $(k+1)$ -ом временном слое

$$\begin{aligned} \frac{(U)_i^{k+1} - (U)_i^k}{\tau} &= F_i(x_i, (U)_i^{k+1}, \Delta_x (U)_i^{k+1}, \Delta_x^2 (U)_i^{k+1}) + \\ &+ f_i((U)_1^k, \dots, (U)_m^k). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Системы (3.3) и (3.4) запишем в формальном виде:

$$L_l^n U^n = 0 \text{ или } L^n U^n = 0 \quad (l = 1, \dots, m).$$

Из приведенных схем видно, что разностный оператор  $L^n$  сопоставляет сеточной функции  $U^n = [(U)_1^k, \dots, (U)_m^k]$  другую сеточную функцию  $L^n U^n$ , определенную на той же сетке. Пусть  $[U]_n$  — значения функции  $U = (U_1, \dots, U_m)$  в узлах сетки.

**О п р е д е л е н и е.** Система разностных уравнений  $L_l^n U^n = 0$  аппроксимирует на решении  $U = (U_1, \dots, U_m)$  систему дифференциальных уравнений  $L_l U = 0$  с порядком  $O(\tau^{a_1} + h^{a_2})$ , если

$$\max_{i,k} |L_l^n [U]_n| \leq M(\tau^{a_1} + h^{a_2}), \quad (3.5)$$

$l = 1, \dots, m.$

Здесь  $M$  — постоянная;

$a_1$  — порядок аппроксимации по временной переменной;

$a_2$  — то же, по пространственной.

Другими словами, величина невязки разностных уравнений при подстановке в них решений исходной дифференциальной задачи должна быть порядка  $O(\tau^{a_1} + h^{a_2})$  равномерно по всем точкам сетки и для всех уравнений.

Нетрудно проверить, что при сделанных ранее предположениях относительно решения исходной задачи как явная схема (3.3), так и неявная (3.4) имеют первый порядок аппроксимации по  $t$  и второй — по  $x$ .

Аналогичным образом определяется понятие аппроксимации граничных и начальных условий.

Дискретная задача (3.3) предельно проста. Зная начальные значения  $(U)_i^0$  ( $i = 0, 1, \dots, n$ ), вычисляем по соотношениям

$$(U)_i^{k+1} = a_{ii}(U)_i^k + b_{ii}(U)_i^k + c_{ii}(U)_i^k + \tau f_i(U_i^k) \quad (3.6)$$

значения  $(U)_i^l$  ( $i = 1, 2, \dots, n-1$ ).



Краевые условия дают возможность определить  $(U_l)_0^1, (U_l)_n^1$ . Далее, по найденным значениям  $(U_l)_i^1$  вычисляются по тем же формулам (3.6) значения сеточной функции на втором слое —  $(U_l)_i^2$  ( $i = 1, \dots, n-1$ ;  $l = 1, \dots, m$ ) и т.д.

Иначе обстоит дело с неявной схемой (3.4), которая в приведенной форме

$$A_{ll}(U_l)_{i+1}^{k+1} - B_{ll}(U_l)_{i-1}^{k+1} + C_{ll}(U_l)_i^{k+1} = -[(U_l)_i^k + \tau f_l(U_l^k)] \quad (3.7)$$

$$(l = 1, \dots, n-1; l = 1, \dots, m)$$

для каждого фиксированного временного индекса  $k$  представляет собой  $m$  независимых систем линейных алгебраических уравнений с матрицей трехдиагонального вида:

$$a_l U_{i+1} - b_l U_i + c_l U_{i-1} = -\Phi_i,$$

решение которых успешно осуществляется методом прогонки [4], если коэффициенты удовлетворяют соотношениям  $a_l > 0$ ,  $c_l > 0$ ,  $b_l > a_l + c_l$ .

Таким образом, разностные уравнения  $L^n U^n = 0$  вместе с граничными условиями позволяют по значениям

$$U_i^k = ((U_1)_i^k, \dots, (U_m)_i^k)$$

на одном слое вычислять значения  $U^k$  на всех последующих слоях  $t = k\tau$ .

Решение сеточной задачи распадается на одномерные сеточные функции

$$U^k = \underbrace{[(U_1)_0^k, (U_1)_1^k, \dots, (U_1)_n^k, \dots]}_{(U_1)^k}, \underbrace{[(U_m)_0^k, (U_m)_1^k, \dots, (U_m)_n^k]}_{(U_m)^k}.$$

На множестве функций данного вида введем норму:

$$\|U\| = \|(U)_i\| = \max_{i,l} |(U)_i^l|.$$

### Устойчивость

После построения разностной схемы основное значение приобретает вопрос об ее устойчивости в счетном отношении. По разным причинам, скажем, вследствие влияния ошибок округления (машина оперирует с конечным числом разрядов), фактическое решение  $\tilde{U}^k$  может отличаться от точного  $U^k$ . Исследование устойчивости состоит в нахождении условий, при которых

$$\|\varepsilon^k\| = \max_{i,l} |(\varepsilon)_i^k|$$

остается ограниченной при возрастании временного индекса  $k$ . Здесь

$$(\varepsilon)_i^k = (U)_i^k - (\tilde{U})_i^k. \quad (*)$$

Понятно, что неустойчивые схемы для счета непригодны.

Пусть на каком-либо слое допущена ошибка  $\varepsilon^0$ . Принимая его за начальный и учитывая (\*), получим, что при счете по схеме (3.6)

$$(\varepsilon)_i^k = a_{ll}(\varepsilon)_{i+1}^k + b_{ll}(\varepsilon)_i^k + c_{ll}(\varepsilon)_{i-1}^k + \tau \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_l}{\partial U_j}(\varepsilon)_j^k, \quad (3.8)$$

а для неявной схемы (3.7)

$$A_{ll}(\varepsilon_l)_{i+1}^{k+1} - B_{ll}(\varepsilon_l)_i^{k+1} + C_{ll}(\varepsilon_l)_{i-1}^k = - \left[ (\varepsilon_l)_i^k + \tau \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_l}{\partial U_j} (\varepsilon_j)_i^k \right] \quad (3.9)$$

$$(i = 1, \dots, n-1; \quad l = 1, \dots, m)$$

с условиями на границе:

$$(\varepsilon_l)_0^k = g_l(\varepsilon_l)_1^k; \quad (\varepsilon_l)_n^k = g_l^*(\varepsilon_l)_{n-1}^k \quad (3.10)$$

$$(k = 1, 2, \dots).$$

Справедливость последних равенств следует из соотношений, получающихся после аппроксимации граничных условий задачи (3.2):

$$(U_l)_0^k = g_l(U_l)_1^k + C_l; \quad (U_l)_n^k = g_l^*(U_l)_{n-1}^k + C_l^*,$$

где  $g_l, g_l^*, C_l, C_l^*$  — постоянные (не зависящие от  $k$ ).

Так как разностные схемы для погрешностей получаются из соответствующих схем для решений заменой нелинейного члена  $f_l(U_i^k, \dots, U_m^k)$  на  $\sum_{j=1}^m \frac{\partial f_l}{\partial U_j} (\varepsilon_j)_i^k$ , то, как и ранее, процесс вычисления  $\varepsilon^{k+m}$  вполне определен.

Другими словами, задан оператор перехода  $R^{(k)}$  с одного слоя на другой:

$$\varepsilon^{k+1} = R^{(k)}(\varepsilon^k), \quad (3.11)$$

хотя явный вид  $R^{(k)}$  в случае схемы (3.9) неизвестен.

Из (3.11) следует:

$$\varepsilon^k = R^{(k-1)} R^{(k-2)} \dots R^0 \varepsilon^0.$$

Применим неравенство Буняковского:

$$\|\varepsilon^k\| \leq \|R^{(k-1)}\| \cdot \|R^{(k-2)}\| \cdot \dots \cdot \|R^{(0)}\| \cdot \|\varepsilon^0\|. \quad (3.12)$$

Если операторы перехода  $R^{(k)}$  удовлетворяют соотношению

$$\|R^{(k)}\| \leq 1 + \tau S, \quad (3.13)$$

где  $S$  — постоянная величина для всех  $k$ , то из (3.12) следует:

$$\|\varepsilon^k\| \leq (1 + \tau S)^k \|\varepsilon^0\| = \left(1 + \frac{tS}{k}\right)^k \|\varepsilon^0\| < e^{tS} \|\varepsilon^0\|.$$

Отсюда видно, что для любого фиксированного  $t$  при  $\tau \rightarrow 0$ , т. е. при неограниченном увеличении числа шагов по времени, погрешность остается ограниченной. Отметим еще, что при численных расчетах интервал времени, в котором ищется решение, всегда конечен.

В дальнейшем неравенство (3.13) примем за определение устойчивости.

### Сходимость

Обозначим через  $s^k = \{(s_l)_i^k\}$  вектор с компонентами

$$(s_l)_i^k = \tilde{U}_l(ih, k\tau) - (U_l)_i^k,$$

где  $U_l$  — точное решение дифференциальной задачи;

$\tilde{U}_l$  — точное решение сеточных уравнений.

а для неявной схемы (3.7)

$$A_{ll}(\varepsilon_l)_{i+1}^{k+1} - B_{ll}(\varepsilon_l)_i^{k+1} + C_{ll}(\varepsilon_l)_{i-1}^k = - \left[ (\varepsilon_l)_i^k + \tau \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_l}{\partial U_j} (\varepsilon_j)_i^k \right] \quad (3.9)$$

$$(i = 1, \dots, n-1; \quad l = 1, \dots, m)$$

с условиями на границе:

$$(\varepsilon_l)_0^k = g_l(\varepsilon_l)_1^k; \quad (\varepsilon_l)_n^k = g_l^*(\varepsilon_l)_{n-1}^k \quad (3.10)$$

$$(k = 1, 2, \dots).$$

Справедливость последних равенств следует из соотношений, получающихся после аппроксимации граничных условий задачи (3.2):

$$(U_l)_0^k = g_l(U_l)_1^k + C_l; \quad (U_l)_n^k = g_l^*(U_l)_{n-1}^k + C_l^*,$$

где  $g_l, g_l^*, C_l, C_l^*$  — постоянные (не зависящие от  $k$ ).

Так как разностные схемы для погрешностей получаются из соответствующих схем для решений заменой нелинейного члена  $f_l(U_i^k, \dots, U_m^k)$  на  $\sum_{j=1}^m \frac{\partial f_l}{\partial U_j} (\varepsilon_j)_i^k$ , то, как и ранее, процесс вычисления  $\varepsilon^{k+m}$  вполне определен.

Другими словами, задан оператор перехода  $R^{(k)}$  с одного слоя на другой:

$$\varepsilon^{k+1} = R^{(k)}(\varepsilon^k), \quad (3.11)$$

хотя явный вид  $R^{(k)}$  в случае схемы (3.9) неизвестен.

Из (3.11) следует:

$$\varepsilon^k = R^{(k-1)} R^{(k-2)} \dots R^0 \varepsilon^0.$$

Применим неравенство Буняковского:

$$\|\varepsilon^k\| \leq \|R^{(k-1)}\| \cdot \|R^{(k-2)}\| \cdot \dots \cdot \|R^{(0)}\| \cdot \|\varepsilon^0\|. \quad (3.12)$$

Если операторы перехода  $R^{(k)}$  удовлетворяют соотношению

$$\|R^{(k)}\| \leq 1 + \tau S, \quad (3.13)$$

где  $S$  — постоянная величина для всех  $k$ , то из (3.12) следует:

$$\|\varepsilon^k\| \leq (1 + \tau S)^k \|\varepsilon^0\| = \left(1 + \frac{tS}{k}\right)^k \|\varepsilon^0\| < e^{tS} \|\varepsilon^0\|.$$

Отсюда видно, что для любого фиксированного  $t$  при  $\tau \rightarrow 0$ , т. е. при неограниченном увеличении числа шагов по времени, погрешность остается ограниченной. Отметим еще, что при численных расчетах интервал времени, в котором ищется решение, всегда конечен.

В дальнейшем неравенство (3.13) примем за определение устойчивости.

### Сходимость

Обозначим через  $s^k = \{(s_l)_i^k\}$  вектор с компонентами

$$(s_l)_i^k = \tilde{U}_l(ih, k\tau) - (U_l)_i^k,$$

где  $U_l$  — точное решение дифференциальной задачи;

$\tilde{U}_l$  — точное решение сеточных уравнений.

Как уже отмечалось, порядок аппроксимации дифференциальных уравнений сеточными —  $O(\tau + h^2)$ , поэтому

$$s^{k+1} = R^{(k)}s^k + \tau \cdot O(\tau + h^2), \quad (3.14)$$

что следует из рассмотрения разности

$$L^n U^n - L^n [U]_n.$$

Здесь  $[U]_n$  — значения решения исходной задачи в узлах сетки.

Применяя к (3.14) неравенство Буняковского и соотношение (3.13), учитывая, что  $s^0 = 0$ , получим:

$$\begin{aligned} \|s^{k+1}\| &\leq \|R^{(k)}\| \cdot \|s^k\| + |O(\tau^2 + \tau h^2)| \sum_{i=0}^k \|R^{(i)}\| \leq \\ &\leq |O(\tau^2 + \tau h^2)| \sum_{i=0}^k (1 + \tau S)^i = |O(\tau^2 + \tau h^2)| \frac{(1 + \tau S)^{k+1} - 1}{\tau S} \leq \\ &\leq |O(\tau + h^2)| \frac{e^{\tau S} - 1}{S} = O(\tau + h^2), \end{aligned}$$

т. е.  $U^n \rightarrow U$  равномерно по всем точкам сетки со скоростью  $O(\tau + h^2)$ , когда  $\tau, h \rightarrow 0$ .

Рассуждения этого параграфа носят нестрогий характер, они преследуют методическую цель — показать, как из аппроксимации и устойчивости вытекает сходимость решения сеточных уравнений к решению дифференциальной задачи.

В дальнейших исследованиях будем ограничиваться получением оценок (3.5) и (3.13).

### Вспомогательные утверждения

Рассмотрим явную разностную схему

$$(U)_i^{k+1} = a_{ii}(U)_i^k + b_{ii}(U)_i^k + c_{ii}(U)_i^{k-1} + \tau f_i[(U)_i^k, \dots, (U)_m^k] \quad (3.15)$$

$$(i = 1, \dots, n-1)$$

с граничными условиями

$$(U)_0^{k+1} = g_l (U)_1^{k+1} + C_l; \quad (U)_n^{k+1} = g_l^* (U)_{n-1}^{k+1} + C_l^* \quad (3.16)$$

Как и ранее, предполагается существование ограниченных производных

$$\sum_{j=1}^m \frac{\partial f_l}{\partial U_j} \leq S \quad (3.17)$$

$$(l = 1, \dots, m),$$

$g_l, g_l^*, C_l, C_l^*$  — постоянные (вообще допускается зависимость от временного индекса), удовлетворяющие соотношениям

$$|g_l|, |g_l^*| \leq 1. \quad (3.18)$$

**Теорема 1.** Если имеют место соотношения

$$|a_{ii}| + |b_{ii}| + |c_{ii}| \leq 1 \quad (l = 1, \dots, m; \quad i = 1, \dots, n-1) \quad (3.19)$$

и выполнены условия (3.17), (3.18), то дискретная задача (3.15), (3.16) устойчива.

На самом деле, оператор перехода  $R^{(k)}$  для ошибки примет вид:

$$(\varepsilon_l)_i^{k+1} = a_{ii}(\varepsilon_l)_{i+1}^k + b_{ii}(\varepsilon_l)_i^k + c_{ii}(\varepsilon_l)_{i-1}^k + \tau \sum_{j=1}^m \frac{\partial \tilde{f}_l}{\partial U_j} (\varepsilon_l)_i^k, \quad (3.20)$$

$$(\varepsilon_l)_0^{k+1} = g_l(\varepsilon_l)_1^{k+1}; \quad (\varepsilon_l)_n^{k+1} = g_l^*(\varepsilon_l)_{n-1}^{k+1} \quad (l = 1, \dots, m), \quad (3.21)$$

Граничные условия (3.21) и неравенства (3.18) показывают, что максимальное значение ошибки достигается во внутренних точках сетки, на которой справедливы уравнения (3.20).

Рассмотрим одно из них (фиксируем  $l$ ). Так как сумма модулей коэффициентов не превышает единицы,

$$|(\varepsilon_l)_i^{k+1}| \leq \max_i |(\varepsilon_l)_i^{k+1}| + \tau \max_{j,i} |(\varepsilon_l)_i^k| \sum_{j=1}^m \left| \frac{\partial \tilde{f}_l}{\partial U_j} \right|.$$

Учитывая (3.17), усилим неравенство

$$|(\varepsilon_l)_i^{k+1}| \leq \max_{j,i} |(\varepsilon_l)_i^k| (1 + \tau S)$$

или

$$\|(\varepsilon_l)_i^{k+1}\| \leq \|\varepsilon^k\| (1 + \tau S).$$

Так как последнее неравенство справедливо для любого  $i, l$ , то

$$\|\varepsilon^{k+1}\| < (1 + \tau S) \|\varepsilon^k\|,$$

т. е. для оператора перехода  $R^{(k)}$  имеет место оценка

$$\|R^{(k)}\| \leq 1 + \tau S.$$

Устойчивость явной схемы (3.15), (3.16) доказана.

Для изучения неявных схем нам потребуется

**Теорема 2.** Краевая задача

$$A_i \varepsilon_{i+1} - B_i \varepsilon_i + C_i \varepsilon_{i-1} = -\varphi_i \quad (3.22)$$

$$(i = 1, \dots, n-1),$$

$$\varepsilon_0 = g(\varepsilon_1), \quad \varepsilon_n = g^*(\varepsilon_{n-1})$$

при выполнении неравенств

$$A_i > 0, B_i > 0, B_i \geq A_i + C_i + \delta \quad (\delta > 0) \quad (3.23)$$

имеет единственное решение, причем величины  $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$  удовлетворяют оценке

$$|\varepsilon_i| \leq \frac{1}{\delta} \max_{1 \leq m \leq n-1} |\varphi_m|. \quad (3.24)$$

Доказательство проведем по схеме, приведенной в [4], используя специфику граничных условий (в [4] рассмотрена первая краевая задача).

Известно, что для существования и единственности решения необходимо, чтобы однородная система ( $\varphi_i = 0$ ) имела лишь нулевое решение.

Если бы (3.24) было доказано для любого решения уравнений (3.22), то из него следовало бы равенство нулю произвольного решения однородной системы. Таким образом, для доказательства теоремы требуется установить справедливость неравенства (3.24).

Анализ краевых условий показывает, что наибольшее по модулю  $\varepsilon_k$  достигается во внутренней точке сетки. Так как  $0 \leq k \leq n-1$ , то для  $\varepsilon_k \geq 0$  справедливы следующие неравенства:

$$-\varphi_k = A_k \varepsilon_{k+1} - B_k \varepsilon_k + C_k \varepsilon_{k-1} \leq (A_k - B_k + C_k) \varepsilon_k \leq -\delta \varepsilon_k.$$

Отсюда вытекает

$$\varepsilon_k \leq \frac{1}{\delta} |\varphi_k| \leq \frac{1}{\delta} \max_m |\varphi_m|$$

и справедливость доказываемого неравенства

$$\varepsilon_i \leq \frac{1}{\delta} \max_m |\varphi_m|. \quad (3.25)$$

Чтобы не проводить неудобных выкладок, когда  $\varepsilon_k < 0$ , отметим, что сеточная функция  $-\varepsilon_0, -\varepsilon_1, \dots, -\varepsilon_n$  удовлетворяет той же системе уравнений (3.22), где правые части имеют противоположный знак.

Применение неравенства (3.25) дает:

$$-\varepsilon_i \leq \frac{1}{\delta} \max_m |(-\varphi_m)| = -\frac{1}{\delta} \max_m |\varphi_m|. \quad (3.26)$$

Из (3.25) и (3.26) следует:

$$|\varepsilon_i| < \frac{1}{\delta} \max_m |\varphi_m| \quad (3.27)$$

$$(i = 0, 1, \dots, m).$$

Аналогичными рассуждениями доказывается существование и единственность решений для всех неявных трехточечных сеточных уравнений, встречающихся в дальнейшем.

Вернемся к неявной схеме

$$\begin{aligned} A_{ii}(U_i)^{k+1} - B_{ii}(U_i)^{k+1} + C_{ii}(U_i)^{k+1} = \\ = -[(U_i)^k + \tau f_i((U_i)^k, \dots, (U_m)^k)] \end{aligned} \quad (3.28)$$

с теми же граничными условиями (3.16).

Теорема 3. Если предположения теоремы 1 относительно  $f_i$  ( $i = 1, \dots, m$ ) и граничных условий остаются в силе и, кроме того,

$$A_{ii} > 0, C_{ii} > 0, B_{ii} \geq A_{ii} + C_{ii} + \delta \quad (\delta \geq 1),$$

то схема (3.28) устойчива.

Рассмотрим для  $\varepsilon^k$  оператор перехода  $R^{(k)}$  с одного слоя на другой:

$$\begin{aligned} A_{ii}(\varepsilon_i)^{k+1} - B_{ii}(\varepsilon_i)^{k+1} + C_{ii}(\varepsilon_i)^{k+1} = \\ = - \left[ (\varepsilon_i)^k + \tau \sum_{j=1}^m \frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial U_j} (\varepsilon_j)^k \right], \end{aligned}$$

$$(\varepsilon_i)^{k+1} = g_i(\varepsilon_i)^{k+1}; \quad (\varepsilon_i)^{k+1} = g_i^*(\varepsilon_i)^{k+1} \quad (i = 1, \dots, m).$$

Фиксируем  $i$ . Из теоремы 2 следует:

$$|(\varepsilon_i)^{k+1}| \leq \max_m \left| (\varepsilon_i)^k + \tau \sum_{j=1}^m \frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial U_j} (\varepsilon_j)^k \right|.$$

Учитывая (3.17), усилим неравенство

$$|(e_\mu)_i^{k+1}| \leq \max_{j,m} |(e_\mu)_m^k| \left( 1 + \tau \sum_{j=1}^m \left| \frac{\partial f_\mu}{\partial U_j} \right| \right) \leq \|e^k\| (1 + \tau S).$$

Так как последнее неравенство справедливо для любого  $\mu$  и  $m$ , то

$$\max_{l,i} |(e_\mu)_i^{k+1}| = \|e^{k+1}\| \leq (1 + \tau S) \|e^k\|,$$

т. е.

$$\|R^{(k)}\| \leq 1 + \tau S, \quad (3.29)$$

что означает устойчивость схемы (3.28).

Анализ численных методов решения приведен для уравнений параболического типа. К ним относятся уравнения третьей и пятой групп (табл. 1.1), по которым рассчитывается поле температур и концентраций. Уравнения второй группы (табл. 1.1) — гиперболические, — а также смешанные требуют индивидуального подхода к каждому, и алгоритмы решения будут разобраны ниже для каждого вида этих уравнений.

### § 3. ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

Параболические уравнения, встречающиеся при моделировании каталитических процессов, — уравнения третьей и пятой групп. Выше были проанализированы в общем виде некоторые численные методы их решения. Здесь будет рассмотрена реализация общих подходов к отдельным уравнениям этого типа. Подробнее использование сеточных методов разберем на примере одного из уравнений, описывающих процесс внутри зерна катализатора. Поскольку подход к решению уравнений третьей и пятой групп одинаков, алгоритмы решения остальных уравнений будут описаны без детального их анализа.

#### Процессы внутри зерна катализатора

Согласно общему подходу к решению задач рассматриваемого класса перейдем к нестационарной задаче, описываемой параболической системой уравнений

$$\frac{\partial x_l}{\partial t} = \frac{\partial^2 x_l}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial x_l}{\partial \rho} + R_3^2 \frac{k_l}{D_l^*} f_l(x_1, \dots, x_m) \quad (3.30)$$

с краевыми условиями

$$\left. \frac{\partial x_l}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0; \quad x_l|_{\rho=1} = x_{l_0}. \quad (3.31)$$

Здесь  $x$  — концентрация;

$k_l$  — константа скорости реакций.

За начальные условия обычно будем брать значения искомых функций на поверхности зерна: при  $t=0$

$$x_l = x_{l_0} \quad (l = 1, \dots, m). \quad (3.32)$$

Установившийся режим находится стационарованием ( $t \rightarrow \infty$ ) решения задачи (3.30) — (3.32).

Выбираем равномерную прямоугольную сетку (рис. 3.2) так, чтобы начало делило первый отрезок пополам:

$$\rho_i = ih - \frac{h}{2}, \quad t_k = k\tau \quad (i = 0, 1, \dots, n; \quad k = 1, 2, \dots),$$

и займемся построением схем численного счета. Здесь  $h, \tau$  — величины шагов по координатам  $\rho$  и  $t$  соответственно.

### Явная схема

Если через  $\Lambda$  обозначим разностный оператор

$$\Lambda x_i = \frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{h^2} + \frac{2}{(i-0,5)h} \cdot \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2h},$$

соответствующий дифференциальному

$$A = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho},$$

то задачу численного интегрирования системы (3.30) — (3.32) можно сформулировать в следующем виде:

$$\frac{(x_i)^{k+1} - (x_i)^k}{\tau} = \Lambda (x_i)^k + R_3^2 \frac{k_l}{D_l^*} f_l [(x_1)^k, \dots, (x_m)^k] \quad (3.33)$$

$$(i = 1, \dots, n-1).$$

Граничные условия:

$$(x_i)^{k+1} = (x_i)^{k+1}, \quad (x_i)^{k+1} = x_{i_0}. \quad (3.34)$$

Начальные условия:

$$(x_i)^0 = x_{i_0}, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad l = 1, \dots, m. \quad (3.35)$$

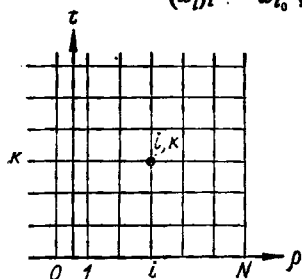


Рис. 3.2. Равномерная сетка задачи внутренней диффузии.

Вследствие применения центральных разностей порядок аппроксимации производных по пространственной переменной —  $h^2$ , а общий порядок аппроксимации дифференциальных уравнений (3.30) разностными (3.33) —  $0(\tau + h^2)$ , что нетрудно проверить, разлагая каждую компоненту уравнения (3.33) в ряд Фурье в точке  $(i, k)$ .

Краевые условия (3.34) абсолютно точны: первое соотношение отражает симметричность искомых решений относительно начала координат, второе — заданную концентрацию на поверхности зерна.

Разрешая уравнения (3.33) относительно  $((x_i)^k)$ , приходим к форме, удобной для программирования:

$$\begin{aligned} (x_i)^{k+1} = & r \left( 1 + \frac{1}{i-0,5} \right) (x_{i+1})^k + (1-2r) (x_i)^k + r \left( 1 - \frac{1}{i-0,5} \right) \times \\ & \times (x_{i-1})^k + \tau R_3^2 \frac{k_l}{D_l^*} (f_l)^k \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$(i = 1, \dots, n-1); \quad l = 1, \dots, m).$$

Здесь, как и в дальнейшем,  $r = \tau/h^2$ , а  $(f_l)^k$  означает функцию, аргументы которой взяты в точке  $(i, k)$ .



За исключением точки  $i=1$ , коэффициенты сеточных уравнений (3.36) положительны и в сумме не превышают единицы, если  $r \leq \frac{1}{2}$ .

При  $i=1$

$$(x_1)^{k+1} = 3r(x_2)^k + (1-2r)x_1^k - r(x_0)^k + \tau R_3^2 \frac{k_l}{D_l^*} (f_1)^k$$

или, если вспомнить про первое соотношение из (3.34),

$$(x_1)^{k+1} = 3r(x_2)^k + (1-3r)(x_1)^k + \tau R_3^2 \frac{k_l}{D_l^*} (f_1)^k.$$

Следовательно, при  $r \leq 1/3$  по теореме 1 схема (3.33) — (3.35) устойчива и ее решение при достаточно малых  $h$  и  $\tau$  аппроксимирует решение нестационарной задачи (3.30) — (3.32).

Неравенство

$$\tau \leq \frac{h^2}{3} \quad \left( r \leq \frac{1}{3} \right) \quad (3.37)$$

достаточно для устойчивости. В большинстве случаев, как показывают расчеты, устойчивость не нарушается и при

$$\frac{h^2}{3} \leq \tau \leq \frac{h^2}{2},$$

когда ошибка может возрастать лишь в одном узле  $i=1$ . Но иногда создаются такие условия, что решение со временем начинает колебаться около стационарного режима или сходится очень медленно. При  $\tau > \frac{h^2}{2}$  решение счетной задачи всегда неограниченно раскачивается.

Выполнение условия (3.37) гарантирует от подобных эффектов.

### Неявная схема

Неравенство (3.37), накладывающее жесткое ограничение на шаг по временной координате, никак не связано с природой дифференциальной задачи, а вызвано лишь несовершенством явных сеточных методов применительно к последней. Чтобы избежать указанных ограничений, перейдем к неявной схеме

$$\frac{(x_l)^{k+1} - (x_l)^k}{\tau} = \Lambda(x_l)^{k+1} + R_3^2 \frac{k_l}{D_l^*} (f_l)^k \quad (3.38)$$

$$(i = 1, 2, \dots, n-1; l = 1, 2, \dots, m)$$

с граничными и начальными условиями (3.34), (3.35). Все утверждения относительно аппроксимации исходной задачи и краевых условий остаются в силе и в данном случае.

После умножения всех уравнений на  $\tau$  и приведения подобных членов система (3.38) примет вид

$$A_i(x_l)^{k+1}_{i+1} - B(x_l)^{k+1}_i + C_i(x_l)^{k+1}_{i-1} = -(\varphi_l)^k_i \quad (3.39)$$

$$(i = 1, \dots, n-1; l = 1, \dots, m),$$

где

$$A_i = r \left( 1 + \frac{1}{i-0,5} \right), \quad B = 1 + 2r, \quad (3.40)$$

$$C_i = r \left( 1 - \frac{1}{i-0,5} \right), \quad (\varphi_l)^k_i = x_i^k + \tau R_3^2 \frac{k_l}{D_l^*} (f_l)^k$$

Таким образом, разностная схема (3.39) вместе с граничными условиями дает  $m$  независимых систем линейных алгебраических уравнений вида

$$\begin{aligned} A_i x_{i+1} - B x_i + C_i x_{i-1} &= -\varphi_i \\ (i &= 2, \dots, n-1), \\ x_0 &= x_1; \quad x_n = x_{n0}. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Здесь  $\varphi$  — известная функция. Требуется определить  $x_0, x_1, \dots, x_{n-1}$ .

Решение уравнений типа (3.41) отыскиваем методом прогонки [4], используя соотношения:

$$P_{i+1} = \frac{A_i}{B - C_i P_i} \quad (i = 1, \dots, n-1), \quad (3.42)$$

$$Q_{i+1} = \frac{C_i Q_i + \varphi_i}{B - C_i P_i} \quad (i = 1, \dots, n-1), \quad (3.43)$$

$$x_i = P_{i+1} x_{i+1} + Q_{i+1} \quad (i = n-1, \dots, 0). \quad (3.44)$$

Здесь  $P_i, Q_i$  — прогоночные коэффициенты. Сначала проводится вычисление по рекуррентным формулам (3.42), (3.43) (прогонка) коэффициентов  $Q_{i+1}, P_{i+1}$ . Начальные значения  $P_1 = 1; Q_1 = 0$  определяются из левого граничного условия  $x_0 = x_1$  и соотношения (3.44) при  $i=0$ . Зная прогоночные коэффициенты и правое граничное условие, по формуле (3.44) (обратная прогонка) вычисляем неизвестные  $x_i$ .

Следует отметить, что прогонка является модификацией хорошо известного метода Гаусса. В ней существенным образом используется трехточечность схемы.

Устойчивость счета по формулам (3.42) — (3.44) обеспечивается выполнением неравенств

$$A_i > 0, \quad C_i > 0, \quad B > A_i + C_i + \delta \quad (\delta > 0). \quad (3.45)$$

Для узлов сетки  $i=2, \dots, n-1$  эти соотношения имеют место с  $\delta=1$ . При  $i=1$ .

$$3r(x)_{j2} - (1 - 2r)(x)_{j1} - r(x)_{j0} = -(\varphi)_{j1}^k.$$

Учитывая левое граничное условие  $(x)_{j0} = (x)_{j1}$ , получим:

$$3r(x)_{j2} - (1 + 4r)(x)_{j1} + r(x)_{j0} = -(\varphi)_{j1}^k.$$

Таким образом, (3.45) выполняется для всех точек сетки с  $\delta=1$ , и можно применить теорему 3, откуда следует устойчивость счета по неявной схеме (3.38).

Отметим, что для неизотермических процессов расчетная система должна быть дополнена уравнением теплопроводности. Обозначая температуру через  $x_{m+1}$ , приходим к системе из  $m+1$  уравнений вида (3.30). Методика расчетов и доказательство устойчивости остаются прежними.

Задача с учетом внешней диффузии (уравнение (66) из табл. 1.1) отличается от рассмотренной (3.30) граничным условием при  $\rho=1$ , а именно

$$\begin{aligned} -\frac{\partial x_i}{\partial \rho} \Big|_{\rho=1} &= \gamma_3 (x_i|_{\rho=1} - x_{i0}) \\ (\gamma_3 &= \frac{\alpha_3 R_3}{D_3^*}). \end{aligned} \quad (3.46)$$

В схеме численного счета это скажется только на граничном условии, которое можно получить из следующего граничного условия в разностном виде:

$$-\frac{x_{n-1} - x_n}{h} = \gamma_3 (x_n - x_0) \quad (3.47)$$

и соотношения (3.44). Методика расчета внутридиффузионной задачи с внешней диффузией остается такой же (уравнения (3.42) — (3.44)), но правое граничное условие будет следующим:

$$x_n = \frac{Q_n + \gamma_3 h x_0}{1 + \gamma_3 h - P_n}. \quad (3.47a)$$

Аналогичное выражение будет для уравнения теплового баланса.

### *Некоторые свойства предлагаемых схем*

Выше отмечалось, что схемы для численных расчетов можно рассматривать как итерационные процессы, в которых номер временного слоя представляет номер итерации, а шаг по временной координате определяет скорость сходимости процесса.

Проведем анализ итерационного процесса, соответствующего неявной схеме

$$\frac{x_i^{k+1} - x_i^k}{\tau} = \frac{x_{i+1}^{k+1} - 2x_i^{k+1} + x_{i-1}^{k+1}}{h^2} - R_3^2 \frac{k}{D^*} x_i^k, \quad (3.48)$$

которая аппроксимирует уравнение диффузии внутри плоского зерна катализатора для одного реагента с реакцией первого порядка:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial^2 x}{\partial \rho^2} - R_3^2 \frac{k}{D^*} x,$$

где  $x$  — концентрация;  $k$  — константа скорости;  $D^*$  — эффективный коэффициент диффузии. Отклонение от стационарного режима  $\varepsilon_i^k$  в силу линейности системы (3.48) удовлетворяет этим же уравнениям с граничными условиями

$$\varepsilon_0^k = \varepsilon_1^k, \quad \varepsilon_n^k = 0. \quad (3.49)$$

Пусть задано начальное отклонение

$$\varepsilon_0^0 = (\varepsilon_1^0, \dots, \varepsilon_{n-1}^0).$$

Рассмотрим систему линейно независимых функций

$$\psi_j = \cos\left(j - \frac{1}{2}\right)\pi x_j \quad (j = 1, \dots, n-1).$$

Нетрудно видеть, что они удовлетворяют граничным условиям (3.49). Будем искать частные решения задачи (3.48) в виде

$$\lambda_j^k \psi_j(x_j). \quad (3.50)$$

Подставляя (3.50) в уравнение (3.48), получим

$$\lambda_j = \frac{1 - \tau R_3^2 \frac{k}{D^*}}{1 + \frac{2\tau}{h^2} [1 - \cos \pi(j - 0,5)h]}. \quad (3.51)$$

Отсюда следует, что ошибку можно представить в виде

$$\varepsilon_i^k = \sum_{j=1}^{n-1} a_j \lambda_j^k \cos(j-0,5)\pi x_j, \quad (3.52)$$

где  $a_j$  — коэффициенты разложения  $\varepsilon^0$  по функциям  $\psi_j$ . Следовательно, для сходимости итерационного процесса необходимо и достаточно, чтобы  $|\lambda_j| < 1$ .

Последние неравенства выполнены при

$$\tau < 2 \frac{D^*}{R_3^2 k}. \quad (3.53)$$

Таким образом, скорость сходимости нашего итерационного процесса можно сравнить со сходимостью геометрической прогрессии

$$a_n = Cq^n,$$

где

$$|q| \leq \left| 1 - \tau R_3^2 \frac{k}{D^*} \right|.$$

При  $\tau \rightarrow 2D^*/R_3^2 k$  и  $\tau \rightarrow 0$ ;  $\lambda_j \rightarrow \pm 1$ ,

поэтому число итераций возрастает до бесконечности. Для  $\tau = D^*/R_3^2 k$  требуется всего лишь одна итерация, так как  $\lambda = 0$ . На самом деле, подставляя в уравнение (3.48)

$$\tau = D^*/R_3^2 k,$$

получим схему

$$\frac{x_{i+1}^{k+1} - 2x_i^{k+1} + x_{i-1}^{k+1}}{h^2} - R_3^2 \frac{k}{D^*} x_i^{k+1} = 0,$$

соответствующую стационарному уравнению

$$\frac{d^2 x}{d\rho^2} - R_3^2 \frac{k}{D^*} x = 0.$$

График зависимости числа необходимых итераций от временного шага для достижения стационарного режима с определенной точностью дан на рис. 3.3.

Для явной схемы

$$\frac{x_i^{k+1} - x_i^k}{\tau} = \frac{x_{i+1}^k - 2x_i^k + x_{i-1}^k}{h^2} - R_3^2 \frac{k}{D^*} x_i^k \quad (3.54)$$

$$\lambda_j = 1 - \frac{2\tau}{h^2} (1 - \cos(j-0,5)\pi h) - \tau R_3^2 \frac{k}{D^*}.$$

Требование, чтобы  $|\lambda_i| < 1$ , приводит к ограничению на шаг по временной координате

$$\tau \leq \frac{h^2}{2 + \frac{h^2}{2} R_3^2 \frac{k}{D^*}}, \quad (3.55)$$

асимптотический вид которого ( $h \rightarrow 0$ ) следующий:

$$\tau \leq \frac{h^2}{2}.$$

При выполнении условия (3.55) и малых  $h$  и  $\tau$  численное решение близко к действительному течению переходного процесса. Из физических соображений ясно, что чем меньше шаг по времени, тем больше число шагов (итераций) требуется сделать, чтобы с определенной степенью точности приблизиться к стационарному режиму. График зависимости числа итераций от шага по времени приведен на рис. 3.4.

Из соотношения (3.55) вытекает, что уменьшение  $h$  в  $k$  раз потребует уменьшения  $\tau$ , а следовательно, и увеличения числа итераций в  $k^2$  раз.

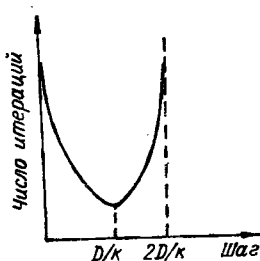


Рис. 3.3. Зависимость числа итераций от величины шага для задачи внутренней диффузии (неявная схема).

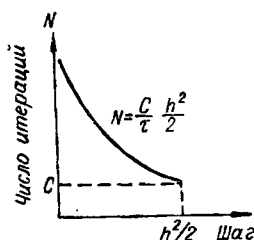


Рис. 3.4. Зависимость числа итераций от величины шага для задачи внутренней диффузии (явная схема).

Практика расчетов показывает, что аналогичная картина наблюдается во всех рассматриваемых ниже задачах, хотя и не в столь явном виде.

### О выборе шага по времени

Все программы для численных расчетов по неявной схеме производят автоматический поиск требуемого шага по временной координате. Допустим, что мы задались заведомо большой величиной  $\tau$ . Решение в силу того, что некоторые  $|\lambda_i| > 1$ , будет раскачиваться. Тогда шаг уменьшается в 2 раза. Этот процесс продолжается до тех пор, пока не будет наблюдаться колебаний около стационарного режима.

Если подобный алгоритм поиска применить к схеме (3.48), то все  $\lambda_i$  окажутся в интервале  $0 < \lambda_i < 0,5$  и наш итерационный процесс будет сходиться быстрее геометрической прогрессии  $a_n = (0,5)^n$ , т. е. ошибка за одну итерацию уменьшается по крайней мере в два раза.

Так как начальная погрешность не превышает единицы ( $|x| < 1$ ), то из условия

$$\left(\frac{1}{2}\right)^n < \varepsilon$$

получим, что число итераций  $k$ , необходимых для достижения стационарного режима, удовлетворяет неравенству

$$k < -\log_2 \varepsilon. \quad (3.56)$$

Таким образом, для получения решения с  $n$  верными двоичными цифрами требуется не более  $n$  итераций.

Оценка (3.56) довольно грубая: мы выбираем начальное приближение равным граничному условию, что сокращает число итераций, и  $|\lambda_i|$  обычно меньше  $1/2$  ( $\lambda_i = 1/2$  — предельный случай при подобном поиске).

Несколько сложнее обстоит дело при произвольном кинетическом члене:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial^2 x}{\partial p^2} + \frac{2}{p} \frac{\partial x}{\partial p} + R_3^2 \frac{k}{D^*} f(x).$$

Разностная схема для ошибки при прежних обозначениях примет вид

$$A_i \varepsilon_{i+1}^{k+1} - B \varepsilon_i^{k+1} + C_i \varepsilon_{i-1}^{k+1} = - \left( 1 + \varepsilon R_3^2 \frac{k}{D^*} \frac{\partial f(\tilde{x}_i^k)}{\partial x} \right) \varepsilon_i^k,$$

где  $\tilde{x}_i^k$  есть среднее значение между  $x_i^k$  и решением стационарной задачи.

Из теоремы 2 следует:

$$\|\varepsilon^{k+1}\| \leq \max_i \left| 1 + \varepsilon \tau R_3^2 \frac{k}{D^*} \frac{\partial f(\tilde{x}_i^k)}{\partial x} \right| \|\varepsilon_i^k\|. \quad (3.57)$$

Так как  $\frac{\partial f}{\partial x}$  всегда отрицательна, то при достаточно малых  $\tau$  процесс итераций будет сходиться. Принципиально существуют даже такие

$$\tau_i = - \frac{D^*}{R_3^2 k} \cdot \frac{1}{\frac{\partial f(\tilde{x}_i)}{\partial x}}, \quad (3.58)$$

что за одну итерацию ошибка исчезнет, но для практики в общем случае это выражение использовано быть не может, так как оно зависит от искомого решения. Если же есть уверенность, что при некотором  $x^0$

$$\frac{\partial f(x^0)}{\partial x} \approx \frac{\partial f(x)}{\partial x},$$

где  $x$  — решение стационарной задачи, то следует взять  $x^0$  за начальное значение и положить

$$\tau = - \frac{D^*}{R_3^2 k \frac{\partial f(x^0)}{\partial x}}.$$

Неравенство (3.57) показывает, что характер сходимости в общем случае не отличается от простейшего итерационного процесса, рассмотренного выше.

### Задача продольного смешения

Соответствующую данному случаю нестационарную систему уравнений (см. (9) из табл. 1.1)

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_i}{\partial t} &= \frac{1}{\text{Pe}_D} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x_i}{\partial \xi} + f(x_1, \dots, x_m, T), \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{1}{\text{Pe}_T} \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - \frac{\partial T}{\partial \xi} + B(T_x - T) + \Delta T_{ad_0} f_0(x_1, \dots, T) \end{aligned} \quad (3.59)$$

с граничными условиями: при  $\xi=0$

$$\frac{\partial x_j}{\partial \xi} = \text{Pe}_D (x_j - x_j^0); \quad \frac{\partial T}{\partial \xi} = \text{Pe}_T (T - T_0), \quad (3.60)$$

при  $\xi=1$

$$\frac{\partial x_j}{\partial \xi} = \frac{\partial T}{\partial \xi} = 0$$

и начальными условиями: при  $t=0$

$$x_j = x_j^0; \quad T = T^0$$

(здесь  $x_j$  — концентрации,  $f$  — скорости образования веществ,  $\Delta T_{\text{ад}_0} f_0$  — скорость тепловыделения) перепишем в компактной форме:

$$\frac{\partial x_j}{\partial t} = A_j x_j + f_j, \quad (3.61a)$$

$$\xi=0: \quad \frac{\partial x_j}{\partial \xi} = \text{Pe}_j (x_j - x_j^0), \quad (3.61б)$$

$$\xi=1: \quad \frac{\partial x_j}{\partial \xi} = 0,$$

$$t=0: \quad x_j = x_j^0, \quad j=1, \dots, m+1.$$

Здесь приняты обозначения:

$$A_j = \frac{1}{\text{Pe}_{Dj}} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (j=1, \dots, m),$$

$$A_{m+1} = \frac{1}{\text{Pe}_T} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{\partial}{\partial \xi} - B, \quad \text{Pe}_{m+1} = \text{Pe}_T,$$

$$f_{m+1} = BT_x + \Delta T_{\text{ад}_0} f_0,$$

$$x_{m+1} \approx T, \quad x_{m+1}^0 = T^0.$$

Начальные значения обычно удовлетворяли соотношениям:

$$0 \leq x_j^0 \leq 1 \quad (j=1, \dots, m); \quad T^0 = T_0 \text{ или } T^0 = T_x.$$

Установившееся распределение температур и концентраций соответствует решению стационарной задачи

$$A_j x_j + f_j = 0 \quad (j=1, \dots, m+1)$$

с граничными условиями (3.61 б).

#### Явная схема

Выберем обычную прямоугольную сетку

$$\xi = ih \quad (i=0, 1, \dots, n), \quad t = k\tau \quad (k=0, 1, \dots).$$

Если  $\Lambda_j$  — разностный оператор, соответствующий дифференциальному  $A_j$ , то задачу (3.59) — (3.61) можно свести к решению разностных уравнений

$$\frac{(x_j)_{i+1}^k - (x_j)_i^k}{\tau} = \Lambda_j (x_j)_i^k + (f_j)_i^k, \quad (3.62)$$

$$i=1, \dots, n-1;$$

граничные условия: ( $k=0, 1, 2, \dots$ )

$$(x_j)_0^{k+1} = \frac{(x_j)_1^{k+1} + \text{Pe}_j h x_j^0}{1 + \text{Pe}_j h}, \quad (3.63)$$

$$(x_j)_n^{k+1} = (x_j)_{n-1}^{k+1},$$

начальные условия:

$$(x_j)^0 = x_i^0. \quad (3.64)$$

При замене производных по пространственной переменной центральными разностями порядок аппроксимации дифференциальных уравнений (3.59) разностными (3.62) —  $O(h^2 + \tau)$ .

Для аппроксимации граничных условий применялись односторонние разности.

После приведения уравнений (3.62) к явной форме:

$$(x_j)_{i+1}^{k+1} = a_j x_{i+1}^k + b_j x_i^k + c_j x_{i-1}^k + \tau (f_j)_i^k, \quad (3.65)$$

$$i = 1, \dots, n-1$$

для коэффициентов получим выражения:

$$a_j = \frac{\tau}{h} \left( \frac{1}{Pe_j h} - \frac{1}{2} \right),$$

$$c_j = \frac{\tau}{h} \left( \frac{1}{Pe_j h} + \frac{1}{2} \right)$$

$$(j = 1, \dots, m+1),$$

$$b_j = 1 - \frac{2\tau}{Pe_j h^2}$$

$$b_{m+1} = 1 - \frac{2\tau}{Pe_T h} - \tau B$$

$$(j = 1, \dots, m).$$

Потребуем, чтобы все коэффициенты были положительны, т. е.

$$h < \frac{2}{\max_j Pe_j} \quad (3.66)$$

$$\tau \leq \min_j \left( \frac{Pe_j h^2}{2}, \frac{Pe_T h^2}{2 + B Pe h^2} \right), \quad (3.67)$$

тогда  $a_j + b_j + c_j \leq 1$ .

Граничные условия (3.63) таковы, что максимальные значения искомых функций достигаются во внутренних точках сетки. Все это обеспечивает устойчивость счета по схеме (3.65), (3.63), (3.64) (теорема 1). Алгоритм счета ясен из самих формул (3.63), (3.66), (3.74).

### Неявная схема

Ограничение (3.67) часто требует излишней затраты вычислительного труда (времени счета), поэтому рассмотрим неявную схему

$$\frac{(x_j)_{i+1}^{k+1} - (x_j)_i^k}{\tau} = \Lambda_j (x_j)_i^{k+1} + (f_j)_i^k \quad (3.68)$$

с граничными и начальными условиями (3.63), (3.64). После умножения уравнений (3.68) на  $\tau$  и приведения подобных членов получим

$$A_i^* (x_j)_{i+1}^{k+1} - B_i^* (x_j)_i^{k+1} + C_j (x_j)_{i-1}^{k+1} = -[(x_j)_i^k + \tau (f_j)_i^k], \quad (3.69)$$

$$i = 1, \dots, n-1,$$

где

$$A_i^* = \frac{\tau}{h} \left( \frac{1}{Pe_j h} - \frac{1}{2} \right) (j = 1, \dots, m+1),$$



$$C_j^* = \frac{\tau}{h} \left( \frac{1}{\text{Pe}_j h} + \frac{1}{2} \right)$$

$$B_j^* = 1 + \frac{2\tau}{\text{Pe}_j h^2} \quad (j = 1, \dots, m),$$

$$B_{m+1} = 1 + \frac{2\tau}{\text{Pe}_T h^2} + B\tau.$$

Разделим уравнения (3.69) на  $A_j^*$

$$(x_j)_{i+1}^{k+1} - B_j(x_j)_{i+1}^{k+1} + C_j(x_j)_{i-1}^{k+1} = -(\varphi_j)_i^k, \quad (3.70)$$

$$i = 1, \dots, n-1,$$

$$B_j = \frac{B_j^*}{A_j^*}; \quad C_j = \frac{C_j^*}{A_j^*}, \quad (\varphi_j)_i^k = \frac{1}{A_j^*} [(x_j)_i^k + \tau(f_j)_i^k].$$

Таким образом, чтобы получить значения  $x_j$  на  $(k+1)$ -ом временном слое, если значения искоемых функций на предыдущем слое известны, требуется решить систему алгебраических уравнений

$$x_{i+1} - Bx_i + Cx_{i-1} = -\varphi_i, \quad (3.71)$$

$$i = 1, \dots, n-1,$$

$$x_0 = \frac{x_1 + \text{Pe} \cdot h \cdot x^0}{1 + \text{Pe} \cdot h}; \quad x_n = x_{n-1}.$$

Индекс  $j$  и верхние индексы опущены.

Для решения задачи (3.71) применялись несколько модифицированные прогоночные формулы [8]:

$$P_{i+1} = \frac{C}{B - P_i}, \quad P_1 = \frac{C}{1 + \text{Pe}h},$$

$$Q_{i+1} = P_{i+1}(Q_i + \varphi_i), \quad Q_1 = \frac{\text{Pe}hx^0}{1 + \text{Pe}h} \quad (i = 1, \dots, n-1), \quad (3.72)$$

$$x_i = \frac{P_{i+1}x_{i+1} + Q_{i+1}}{C}, \quad x_n = \frac{Q_n}{C - P_n} \quad (i = n-1, \dots, 0).$$

Потребуем, чтобы для любого  $j$  коэффициенты  $B$  и  $C$  были положительны. Для этого необходимо, чтобы

$$h < \frac{2}{\max_j \text{Pe}_j}. \quad (3.73)$$

Из неравенства (3.73) следует:

$$A + C < B \quad (A=1), \quad (3.74)$$

что обеспечивает устойчивость счета по формулам (3.72).

$$A_j^* > 0; \quad B_j^* > 0; \quad C_j^* > 0;$$

$$B_j^* \geq A_j^* + C_j^* + \delta; \quad \delta = 1; \quad (3.75)$$

$$j = 1, \dots, m+1.$$

Последние соотношения обеспечивают устойчивость счета по неявной схеме (3.68) с граничными условиями (3.63) (теорема 3).

Условие устойчивости (3.73) при увеличении  $\text{Pe}_j$  требует мелкого шага по пространственной переменной. Встает вопрос об увеличении этого шага. Оказывается, в ряде случаев можно считать с гораздо большим шагом, нарушая критерий устойчивости, так как погрешность счета на

вычислительной машине с достаточно большой разрядной сеткой не успевает значительно возрасти и исказить результат. Однако, заранее практически невозможно предсказать влияние вносимых при этом ошибок на результат.

Ниже приводится неявная схема, где ограничение (3.73) снимается.

Если для аппроксимации первой производной по пространственной переменной применять левую разность

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} \Big|_{\xi_i} = \frac{U_i - U_{i-1}}{h},$$

а не центральную, как делалось раньше, то предлагаемая схема может быть представлена в виде

$$A_j^*(x)_{i+1}^{k+1} - B_j^*(x)_i^{k+1} + C_j^*(x)_{i-1}^{k+1} = -(\varphi_j)_i^k, \quad (3.76)$$

где 
$$A_j^* = \frac{\tau}{\text{Pe}_j h^2}, \quad C_j^* = \frac{\tau}{h} \left( \frac{1}{\text{Pe}_j h} + 1 \right) (j = 1, \dots, m+1),$$

$$B_j^* = 1 + \frac{2\tau}{\text{Pe}_j h^2} + \frac{\tau}{h} (j = 1, \dots, m),$$

$$B_{m+1}^* = 1 + \frac{2\tau}{\text{Pe}_T h^2} + \frac{\tau}{h} + \tau B,$$

$$(\varphi_j)_i^k = (x_j)_i^k + \tau (f_j)_i^k.$$

Отсюда видно, что коэффициенты положительны и удовлетворяют соотношениям

$$B_j^* \geq A_j^* + C_j^* + \delta; \quad \delta = 1 \quad (j = 1, \dots, m+1),$$

которые обеспечивают устойчивость схемы.

Уравнения (3.76) можно привести к виду (3.71), а для решения полученных разностных уравнений применить метод прогонки в виде (3.72).

Последняя разностная схема аппроксимирует систему дифференциальных уравнений с первым порядком точности по пространственной координате, так как первую производную мы заменили односторонней разностью. Поэтому следует ожидать, что и ее решение при фиксированном  $h$  будет более грубым по сравнению с решением, полученным при этом же  $h$  по схеме второго порядка (3.61). Конкретные расчеты подтверждают эти предположения. Следовательно, в областях изменения  $\text{Pe}_j$ , при которых критерий устойчивости (3.73) не требует слишком мелкого шага, схема (3.63) оказывается предпочтительной.

### Радиальный перенос в круглой трубке

Соответствующее математическое описание, представленное в виде (уравнение (7) из табл. 1.1)

$$\frac{\partial x_l}{\partial \xi} = \Pi_{Dl} \left( \frac{\partial^2 x_l}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial x_l}{\partial \rho} \right) + f_l(x_1, \dots, x_m, T), \quad (3.77)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \xi} = \Pi_T \left( \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) + \Delta T_{\text{адв}} f_0(x_1, \dots, x_m, T),$$

$$\text{при } \rho = 0 \quad \frac{\partial x_l}{\partial \rho} = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial \rho} = 0, \quad (3.78)$$

$$\text{при } \rho = 1 \quad \frac{\partial x_l}{\partial \rho} = 0; \quad \Pi_T \frac{\partial T}{\partial \rho} = \gamma (T_x - T),$$

при  $\xi = 0$

$$x_l = x_l^0, \quad T = T^0, \quad l = 1, \dots, m, \quad (3.79)$$

аналогично описанию процесса на зерне катализатора, когда реакционная смесь содержит  $m+1$ -ю компоненту, причем  $\xi$  — текущая высота трубки — играет роль времени. Поэтому опускаем анализ устойчивости и ограничимся лишь описанием схемы численного счета, придав системе уравнений (3.77) несколько иной вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_l}{\partial \xi} &= D_l \left( \frac{\partial^2 U_l}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial U_l}{\partial \rho} \right) + J_l(U_1, \dots, U_{m+1}), \\ \frac{\partial U_l}{\partial \rho} \Big|_{\rho=0} &= 0; \quad D_l \frac{\partial U_l}{\partial \rho} \Big|_{\rho=1} = \gamma_l (T_x - U_l|_{\rho=1}); \quad U_l|_{\xi=0} = U_l^0, \\ l &= 1, \dots, m+1, \end{aligned}$$

где

$$U_l = x_l; \quad D_l = \Pi_{Dl}; \quad \gamma_l = 0; \quad U_l^0 = x_l^0 \quad (l = 1, \dots, m),$$

$$U_{m+1} = T; \quad D_{m+1} = \Pi_T; \quad \gamma_{m+1} = \gamma; \quad f_{m+1} = \Delta T_{ад} f_0.$$

Способ выбора сетки и аппроксимации производных остается прежним.

### Явная схема

Обозначим через  $\Lambda U$  разностный оператор

$$\Lambda U = \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + \frac{1}{(i-0,5)h} \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h},$$

соответствующий дифференциальному

$$A = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho}.$$

Тогда задачу приближенного интегрирования системы (3.77) — (3.79) можно представить в виде:

$$\frac{(U_l)_i^{k+1} - (U_l)_i^k}{\tau} = D_l \Lambda (U_l)_i^k + (f_l)_i^k, \quad (3.80)$$

$$l = 1, \dots, m+1,$$

$$(U_l)_0^{k+1} = (U_l)_1^{k+1} \quad (l = 1, \dots, m+1),$$

$$(U_l)_n^{k+1} = (U_l)_{n-1}^{k+1} \quad (l = 1, \dots, m), \quad (3.81)$$

$$D_{m+1} \frac{(U_{m+1})_n^{k+1} - (U_{m+1})_{n-1}^{k+1}}{h} = \gamma [T_x - (U_{m+1})_n^{k+1}]$$

или

$$(U_{m+1})_n^{k+1} = \frac{(U_{m+1})_{n-1}^{k+1} \frac{\gamma h}{D_{m+1}} T_x}{1 + D_{m+1} \frac{h}{\gamma}}, \quad (3.82)$$

$$(U_l)_i^0 = U_l^0 \quad (0 \leq i \leq n; \quad l = 1, \dots, m+1).$$

Для программирования уравнению (3.80) следует придать форму:

$$(U)_i^{k+1} = a_{ii} (U)_{i+1}^k + b_i (U)_i^k + c_{ii} (U)_i^k + \tau (f)_i^k,$$

где

$$\begin{aligned} a_{ii} &= \frac{D_i \tau}{h^2} \left( 1 + \frac{0,5}{i-0,5} \right), \\ c_{ii} &= \frac{D_i \tau}{h^2} \left( 1 - \frac{0,5}{i-0,5} \right), \\ b_i &= 1 - \frac{2D_i \tau}{h^2}. \end{aligned}$$

Нетрудно видеть, что коэффициенты  $a_{ii}$ ,  $b_i$ ,  $c_{ii}$  при

$$\tau < \frac{h^2}{2D} \quad (D = \max_i D_i) \quad (3.83)$$

положительны, и их сумма не превышает единицы. Неравенство (3.83) обеспечивает устойчивость схемы (3.80) — (3.82).

### Неявная схема

При больших коэффициентах диффузии или теплопроводности условие (3.83) накладывает необоснованные ограничения (с точки зрения аппроксимации) на шаг по текущей высоте слоя. Чтобы избежать этого недостатка, следует перейти к неявной схеме, аппроксимируя производные по  $\rho$  на  $k+1$ -ом слое:

$$\begin{aligned} \frac{(U)_i^{k+1} - (U)_i^k}{\tau} &= D_i \Delta (U)_i^{k+1} + (f)_i^k, \\ (i &= 1, \dots, n-1), \end{aligned} \quad (3.84)$$

с граничными и начальными условиями (3.81), (3.82).

После умножения на  $\tau$  и приведения подобных членов любое уравнение из системы (3.84) примет вид:

$$A_i U_{i+1}^{k+1} - B U_i^{k+1} + C_i U_{i-1}^{k+1} = -\varphi_i^k,$$

где

$$\begin{aligned} A_i &= \frac{\tau D_i}{h^2} \left( 1 + \frac{0,5}{i-0,5} \right), \quad C_i = \frac{\tau D_i}{h^2} \left( 1 - \frac{0,5}{i-0,5} \right), \\ B &= 1 + \frac{2\tau D_i}{h^2}, \quad \varphi_i^k = (U)_i^k + \tau (f)_i^k. \end{aligned}$$

Для определения значений каждой из  $(m+1)$ -ой сеточной функции требуется решить систему алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} A_i U_{i+1} - B U_i + C_i U_{i-1} &= -\varphi_i \\ (i &= 1, \dots, n-1), \\ U_0 &= U_1; \quad U_n = U_{n-1}. \end{aligned}$$

Для температуры последнее условие заменяется на

$$U_n = \frac{U_{n-1} - \frac{\gamma h}{D_{m+1}} T_x}{1 + \frac{\gamma h}{D_{m+1}}}.$$

Для ее решения применялся метод прогонки (3.42) — (3.44). Как и раньше, для каждой сеточной функции  $P_1=1$ ,  $Q_1=0$ . Правое граничное условие, необходимое для обратной прогонки, определяется из (3.44) при  $i=n-1$  и (3.81):

$$U_n = \frac{Q_n}{1 - P_n}$$

(для первых  $m$  уравнений)  
или

$$U_n = \frac{\gamma h T_x + Q_n}{1 + \frac{\gamma h}{D_{m+1}} - P_n}$$

(для уравнений температур). Отметим, что по теореме 3 неявная схема абсолютно устойчива.

### Поперечный перенос в межтрубном пространстве

Математическое описание процесса в слое катализатора, находящегося в межтрубном пространстве, было представлено выше — уравнения (1.25). Для случая расположения трубок в вершинах правильного треугольника (рис. 3.5) из условий симметрии можно рассматривать процесс только в области (на рис. 3.5 эта область заштрихована), ограниченной одной стороной треугольника и двумя пересекающимися высотами. В этой области будем рассчитывать поле температур и концентраций.

Математически процесс описывается системой дифференциальных уравнений (3.85). Будем считать, что в трубках противотоком движется свежая реакционная смесь, которая, нагреваясь, попадает в катализатор в межтрубном пространстве. Эта схема рассматривается также в одномерном приближении (гл. I, уравнения (1.25)):

$$\begin{aligned} \Pi_D \left( \frac{\partial^2 x_l}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial x_l}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 x_l}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{\partial x_l}{\partial \xi} + \omega_l(x, T) &= 0, \\ \Pi_T \left( \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{\partial T}{\partial \xi} + \Delta T_{ад} \omega_0(x, T) &= 0, \\ \frac{\partial T}{\partial \xi} + \gamma(T - T_x) &= 0 \quad (l = 1, \dots, m). \end{aligned} \quad (3.85)$$

Системе (3.85) придадим несколько иной вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_l}{\partial \xi} &= D_l \left( \frac{\partial^2 U_l}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial U_l}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 U_l}{\partial \varphi^2} \right) + J_l(U_1, \dots, U_{m+1}), \\ \frac{\partial T_x}{\partial \xi} &= -\gamma(U_{m+1} - T_x), \end{aligned} \quad (3.86)$$

где

$$\begin{aligned} U_l &= x_l; \quad D_l = \Pi_D \quad (l = 1, \dots, m), \\ U_{m+1} &= T, \\ J_{m+1} &= \Delta T_{ад} \omega_0(x, T). \end{aligned}$$

Для области изменения координат

$$0 \leq \rho \leq 1,$$

$$0 \leq \xi \leq 1,$$

$$0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{6}$$

граничные условия будут следующие: при  $\rho=r$  (граница 1 из

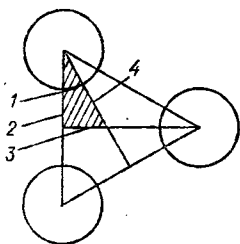


Рис. 3.5. Сечение межтрубного пространства (1—4 — границы области расчета процесса).

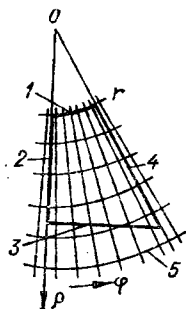


Рис. 3.6. Сетка межтрубного пространства (1—5 — границы области расчета процесса).

$$\frac{\partial U_l}{\partial \varphi} = 0, \quad D_{m+1} \frac{\partial U_{m+1}}{\partial \varphi} = \gamma_1 (U_{m+1} - T_x),$$

$$l = 1, \dots, m$$

при  $\rho = \frac{1}{\cos \varphi}$  (граница 3)

$$\frac{\partial U_l}{\partial n} = 0, \quad l = 1, \dots, m+1,$$

при  $\varphi=0$  (граница 2) и  $\varphi = \frac{\pi}{6}$  (граница 4)

$$\frac{\partial U_l}{\partial \varphi} = 0, \quad l = 1, \dots, m+1,$$

при  $\xi=0$

$$U_l = U_{l_0}, \quad l = 1, \dots, m+1.$$

Выберем сетку, как показано на рис. 3.6, причем

$$\varphi = j\frac{\pi}{2}, \quad j = 1, \dots, n,$$

$$\rho = r + ih, \quad i = 1, \dots, M.$$

Обозначим дифференциальные операторы системы (3.85) через  $A_1$  и  $A_2$ :

$$A_1 = \frac{D}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \quad A_2 = D \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right).$$

Соответствующие им конечно-разностные операторы

$$\Lambda_1 = \frac{D}{\rho^2} \frac{U_{j+1} - 2U_j + U_{j-1}}{l^2},$$

$$\Lambda_2 = D \left( \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + \frac{1}{\rho} \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} \right).$$

С помощью разностных операторов систему (3.85) представим в виде

$$\frac{U_{ij}^{k+1} - U_{ij}^k}{\Delta \xi} = (\Lambda_1 + \Lambda_2) U_{ij}^{k+1} + f_{ij}^k, \quad (3.88)$$

$$\frac{\theta_j^{k+1} - \theta_j^k}{\Delta \xi} = \gamma (\theta_j^k - T_{0j}^k),$$

где

$$\theta = T_x, \quad T = U_{m+1}.$$

Для численного решения системы уравнений (3.85) многомерные схемы оказываются невыгодными: явные схемы, как было показано, условно устойчивы лишь при достаточно малом шаге по времени. Неявные схемы абсолютно устойчивы, но решение многомерных алгебраических уравнений даже для двух пространственных переменных требует много операций. Поэтому система (3.85) решалась локально-одномерным методом переменных направлений [9]. Многомерное уравнение решается по этапам путем введения промежуточных шагов. На промежуточных шагах применяются схемы, приводящие к одномерным алгебраическим задачам. Таким образом, в любой точке сетки в любой момент времени решается одномерное уравнение, что значительно проще.

Для этого интервал  $\Delta \xi$  разбиваем на два полуинтервала. Тогда система (3.88) принимает вид:

$$I) \quad \frac{U_{ij}^{k+1/2} - U_{ij}^k}{\Delta \xi} = \Lambda_1 U_{ij}^{k+1/2} + f_{ij}^k, \quad (3.89)$$

$$\frac{\theta_j^{k+1} - \theta_j^k}{\Delta \xi} = \gamma (\theta_j^k - T_{0j}^k);$$

$$II) \quad \frac{U_{ij}^{k+1} - U_{ij}^{k+1/2}}{\Delta \xi} = \Lambda_2 U_{ij}^{k+1}.$$

Из (3.89) видно, что на каждом полуинтервале решается одномерная алгебраическая задача для трехточечного разностного уравнения: на первом полуинтервале относительно координат  $\varphi$  (оператор  $\Lambda_1$ ) и на втором полуинтервале относительно координат  $\rho$  (оператор  $\Lambda_2$ ). Следовательно, решая последовательно системы уравнений I и II из (3.89), переходим от  $k$ -го слоя по  $\xi$  к следующему. Система (3.89) аппроксимирует дифференциальные уравнения (3.85) с точностью до величины

$$O(\Delta \xi + h_1^2), \quad \text{где } h_1^2 = \frac{1}{2}(l^2 + h^2).$$

Если в системах (3.89) выписать операторы  $\Lambda_1, \Lambda_2$  и выполнить ряд преобразований, то эти уравнения можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} \text{I)} \quad & U_{j+1} - b_i U_j + U_{j-1} = -\varphi_j, \\ & \theta_j^{k+1} = (1 + \gamma \Delta \xi) \theta_j - \gamma \Delta \xi T_{0j}; \\ \text{II)} \quad & U_{i+1} - B_i U_i + C_i U_{i-1} = -\varphi_i, \end{aligned} \quad (3.90)$$

где

$$\begin{aligned} b_i &= 2 + \frac{(r + ih)^2 l^2}{D \Delta \xi}, \\ \varphi_j &= \frac{(r + ih)^2 l^2}{D \Delta \xi} (U_j + \Delta \xi f_j), \\ B_i &= \frac{2(h^2 + 2D \Delta \xi)(r + ih)}{D \Delta \xi (2r + 2ih + h)}, \\ C_i &= \frac{2r + 2ih - h}{2r + 2ih + h}, \\ \varphi_i &= \frac{2h^2(r + ih)}{2\Delta \xi (2r + 2ih + h)} U_i. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Здесь индексы  $i, k$  в системе I (3.90) и  $j, k$  в системе II (3.90) для удобства записи опущены. К системе I (3.90) граничные условия: при  $\varphi=0$   $U_0=U_1$ , при  $\varphi=\frac{\pi}{6}$   $U_n=U_{n-1}$ ; начальные данные: при  $\xi=0$   $U=U_0$ ;  $\theta=\theta_0=T_0$ .

Рекуррентные соотношения для нахождения  $U, \theta$ , как и для рассмотренных выше одномерных алгебраических уравнений, имеют вид:

$$\begin{aligned} \mu_0 &= b_i - 1, \quad \mu_{j+1} = b_i - \frac{1}{\mu_j}, \\ z_0 &= \frac{\varphi_1}{\mu_1}, \quad z_{j+1} = \frac{z_j + \varphi_{j+1}}{\mu_{j+1}} \\ & \quad (j = 0, 1, \dots, n-2), \\ U_{n-1} &= \frac{z_{n-1} \mu_{n-1}}{\mu_{n-1} - 1}, \quad U_j = \frac{U_{j+1}}{\mu_j} + z_j, \\ \theta_j &= \left( 1 + \frac{D_{m+1} \Delta \xi \gamma}{D_{m+1} - h \gamma_1} \right) \theta_j - \frac{D_{m+1} \Delta \xi \gamma}{D_{m+1} + h \gamma_1} T_{j1} \\ & \quad (j = n-2, \dots, 1). \end{aligned} \quad (3.92)$$

Для системы II (3.90) граничные условия: при  $\rho=0$  (граница 1 рис. 3.6)  $U_0=U_1$ ,

$$T_{j0} = \frac{D_{m+1} T_{j1} + h \gamma_1 \theta_j}{D_{m+1} + h \gamma_1},$$

на границе 5 (рис. 3.6)  $U_{m+1}=\psi$ , где  $\psi$  — значения функций  $U_i$  на радиусе описанной окружности, которые будут определены в дальнейшем. Рекуррентные соотношения для решения системы II (3.90):

$$\mu_{i+1} = B_{i+1} - \frac{C_{i+1}}{\mu_i},$$



$$Z_{i+1} = \frac{\varphi_{i+1} + C_{i+1} Z_i}{\mu_{i+1}} \quad (i = 0, 1, \dots, M), \quad (3.93)$$

$$U_{M+1} = \psi; \quad U_i = \frac{U_{i+1}}{\mu_i} + Z_i \quad (i = M, \dots, 1),$$

$$\begin{aligned} \mu_0 &= 1, \quad Z_0 = 0 \\ \text{для } U_l \quad (l &= 1, \dots, m), \\ \mu_0 &= \frac{D_{m+1} + h\gamma_1}{D_{m+1}}, \quad Z_0 = \frac{\gamma h \delta_0}{D_{m+1} + h\gamma_1} \end{aligned}$$

для  $U_{m+1}$ , чтобы определить значения функций  $\psi$  на радиусе описанной окружности, используем равенство нулю нормальной производной на границе 4 (рис. 3.6), которое можно записать в виде:

$$\frac{\partial U}{\partial n} = \cos \varphi \frac{\partial U}{\partial \rho} - \frac{\sin \varphi}{\rho} \frac{\partial U}{\partial \varphi} = 0,$$

где  $\rho = \frac{1}{\cos \varphi}$ . Это условие можно переписать так:

$$\frac{\partial U}{\partial \rho} = \sin \varphi \frac{\partial U}{\partial \varphi}.$$

Заменяем в этом выражении производные конечными разностями:

$$\frac{U_{j+1} - U_{ji}}{h} = \sin \left( jl - \frac{l}{2} \right) \frac{U_{i+1,l} - U_{ji}}{l} \quad (3.94)$$

или

$$U_{jm+1} = \frac{h}{l} \sin \left( jl - \frac{l}{2} \right) (U_{j+1,m} - U_{jm}) + U_{jm},$$

где

$$m = \text{entier} \left[ \left( \frac{1}{\cos \left( jl - \frac{l}{2} \right)} - r \right) : h \right].$$

Используя вычисленные значения  $U_{jm}$  из системы I (3.90), а также соотношения (3.94), выпишем рекуррентные соотношения для определения  $\psi$ :

$$\begin{aligned} y_{M+1} &= \mu_M, \quad y_i = y_{i+1} \mu_{i-1}, \\ \xi_{M+1} &= 0, \quad \xi_i = \xi_{i+1} + Z_{ij} y_{i+1} \\ (i &= M, M-1, \dots, m+1), \\ \psi &= \frac{\left( \frac{h}{l} \sin \left( jl - \frac{l}{2} \right) (U_{j+1,m} - U_{j,m}) + Z_{jm} \right) y_{m+1}}{\mu_m - 1} - \xi_{m+1}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

### Общая задача в круглой трубке с постоянными коэффициентами

Как и для других краевых задач, рассмотрим нестационарную задачу, получающуюся из уравнения (10) (табл. 1.1.):

$$\begin{aligned} \Pi_D \left( \frac{\partial^2 x}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial x}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\text{Pe}_D} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x}{\partial \xi} + \omega(x, T) &= \frac{\partial x}{\partial t}, \\ \Pi_T \left( \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\text{Pe}_T} \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - \frac{\partial T}{\partial \xi} + \Delta T \quad \omega_0 x, T &= \frac{\partial T}{\partial t}. \end{aligned} \quad (3.96)$$

Здесь  $x$  — концентрации (всего  $N$  компонентов). Решение задачи (3.96) ищется в области

$$\bar{D}(0 \leq \rho \leq 1; 0 \leq \xi \leq 1; 0 \leq t \leq \theta)$$

с граничными условиями: при  $\rho = 0$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \rho} = \frac{\partial T}{\partial \rho} = 0, \\ \frac{\partial x}{\partial \rho} = 0; \quad \Pi_T \frac{\partial T}{\partial \rho} = \gamma(T_x - T), \end{aligned} \right\} \quad (3.97a)$$

при  $\xi = 0$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \xi} = \text{Pe}_D x; \quad \frac{\partial T}{\partial \xi} = \text{Pe}_T (T - T_0), \\ \frac{\partial x}{\partial \xi} = \frac{\partial T}{\partial \xi} = 0, \end{aligned} \right\} \quad (3.97b)$$

с начальными данными: при  $t = 0$

$$x = x^0; \quad T = T^0. \quad (3.98)$$

Здесь проведем сравнительный анализ двух экономичных разностных методов численного интегрирования многомерных уравнений параболического типа, которые применяются также для нахождения решения разностных уравнений, возникающих при использовании метода сеток для интегрирования эллиптических уравнений.

Под экономичной разностной схемой понимается схема, обладающая достоинствами обычных и неявных схем: с одной стороны, при переходе с одного временного слоя на другой число арифметических операций пропорционально числу точек сетки на слое (как в явных схемах), с другой стороны, допустимо любое отношение шагов по времени и пространству (как в неявных схемах).

### Метод дробных шагов

Экономичные разностные схемы дает метод дробных шагов [8], основанный на расщеплении всей разностной схемы на одномерные схемы.

Заменим систему дифференциальных уравнений (3.96) системой конечно-разностных уравнений. Пусть  $l, h, \tau$  — приращения переменных

$\xi, \rho$  и  $t$ , где  $l = \frac{1}{n}$ ,  $h = \frac{2}{2m+1}$ , а  $m$  и  $n$  — натуральные числа. Множество точек плоскости  $\rho, \xi$  с координатами

$$\rho = \left(i - \frac{1}{2}\right)h, \quad \xi = jl \quad (i = 0, 1, \dots, m; \quad j = 0, 1, \dots, n)$$

образуют сетку, в которой первый отрезок по  $\rho$  делится точкой начала координат пополам (аналогично задаче радиального переноса).

Введем следующие одномерные операторы:

$$\left. \begin{aligned} D_l \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) = L_1, \\ B_l \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{\partial}{\partial \xi} = L_2, \end{aligned} \right\} \quad (3.99)$$

где

$$D_l = \Pi_D, \quad B_l = \frac{1}{\text{Pe}_D} \quad (l = 1, \dots, N); \quad D_{N+1} = \Pi_T, \quad B_{N+1} = \frac{1}{\text{Pe}_T},$$

и систему (3.96) представим в виде

$$(L_1 + L_2) U_l + \omega(U) = \frac{\partial U_l}{\partial t}, \quad (3.100)$$

где

$$\omega_{N+1} = \Delta T_{\text{ад}_0} \omega_0, \\ U_l = x \quad (l = 1, \dots, N), \quad U_{N+1} = T.$$

Далее индекс  $l$  будем опускать. Пусть  $\Lambda_1$  и  $\Lambda_2$  разностные операторы, аппроксимирующие  $L_1$  и  $L_2$ :

$$\Lambda_1 U = D \left( \frac{U_{i+1} - 2U_i - U_{i-1}}{h^2} + \frac{1}{\left(i - \frac{1}{2}\right)h} \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} \right),$$

$$\Lambda_2 U = B \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{l^2} - \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2l}.$$

Разностные операторы  $\Lambda_1$  и  $\Lambda_2$  аппроксимируют дифференциальные операторы  $L_1$  и  $L_2$  с порядком  $h^2$  и  $l^2$  соответственно.

С помощью разностных операторов можно записать систему (3.100) в виде

$$\frac{U_{ij}^{k+1} - U_{ij}^k}{\tau} = (\Lambda_1 + \Lambda_2) U_{ij}^{k+1} + \omega_{ij}^k. \quad (3.101)$$

Разобьем интервал  $\tau$  на 2 полуинтервала и запишем систему (3.101) в виде

$$\text{I) } \frac{U_{ij}^{k+\frac{1}{2}} - U_{ij}^k}{\tau} = \Lambda_1 U_{ij}^{k+\frac{1}{2}} + \omega_{ij}^k, \quad (3.102)$$

$$\text{II) } \frac{U_{ij}^{k+1} - U_{ij}^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} = \Lambda_2 U_{ij}^{k+1}.$$

Теперь на каждом полуинтервале будем решать одномерную алгебраическую задачу для трехточечного разностного уравнения. Нетрудно заметить, что одномерная схема (3.102) основана на решении одномерных задач типа радиального и продольного переноса.

Выпишем операторы  $\Lambda_1$  и  $\Lambda_2$  в системе уравнений (3.102) в явном виде и сделаем некоторые преобразования. Тогда система (3.102) примет вид:

$$\begin{aligned} \text{I) } U_{i+1} - b_i U_i + c_i U_{i-1} &= -\varphi_i, \\ \text{II) } U_{i+1} - b U_i + c U_{i-1} &= -\varphi_i. \end{aligned}$$

$$b_i = \frac{2i-1}{i} \left( \frac{h^2}{2\tau D} + 1 \right), \quad c_i = \frac{i-1}{i}, \quad (3.103)$$

$$\varphi_i = \frac{(2i-1)h^2}{2i\tau \text{Pe}} (U_i + \tau \omega_i),$$

$$b = \frac{2(Dl^2 + 2\tau)}{\tau(2 - l \text{Pe})}, \quad c = \frac{2 + l \text{Pe}}{2 - l \text{Pe}}, \quad (3.104)$$

$$\varphi_i = \frac{2l^2 \text{Pe}}{\tau(2 - l \text{Pe})} U_i$$

Здесь  $Pe = \frac{1}{B}$ . Индексы  $k, j$  в I (3.103) и  $k, i$  в II (3.103) для удобства записи опущены. Добавим к системе I начальные данные при  $t=0$ ,  $U=U_0$  и граничные условия (3.97а), в которых производные заменены конечными разностями: при  $\rho=0$

$$U_0 = U_1,$$

при  $\rho=1$

$$\left. \begin{aligned} U_m &= U_{m+1} \quad (l=1, \dots, N), \\ D_{N+1} \frac{U_{m+1} - U_m}{h} &= \gamma(T_x - U_{m+1}). \end{aligned} \right\} \quad (3.105)$$

К системе II (3.103) добавим граничные условия (3.97б), в которых производные тоже заменены конечными разностями: при  $\xi=0$

$$U_1 = (1 + Pe \, l) U_0,$$

при  $\xi=1$

$$U_n = U_{n-1}.$$

Системы I и II (3.102), как показано выше, успешно решаются методом прогонки. Выпишем рекуррентные соотношения:

$$\begin{aligned} \mu_{k+1} &= b_{k+1} - \frac{c_{k+1}}{\mu_k}, \\ z_{k+1} &= \frac{z_k c_{k+1} + \varphi_{k+1}}{\mu_{k+1}}, \\ U_k &= \frac{U_{k+1}}{\mu_k} + z_k, \end{aligned}$$

где  $k$  принимает значения  $i=0, 1, \dots, m-1$  для системы I и  $j=0, 1, \dots, n-2$  для системы II.

Для системы I

$$\begin{aligned} \mu_0 &= 1, \quad z_0 = 0, \\ U_{ml} &= \frac{z_m \mu_m}{\mu_{m-1}} \quad (l=1, \dots, N), \\ U_{m,N+1} &= \frac{\gamma h T_x + z_m (D_{N+1} + h\gamma) \mu_m}{(D_{N+1} + h\gamma) \mu_m - D_{N+1}}, \end{aligned}$$

для системы II

$$\begin{aligned} \mu_0 &= 1 + l \, Pe, \quad z_0 = 0, \\ U_{n-1} &= \frac{z_{n-1} \mu_{n-1}}{\mu_{n-1}}. \end{aligned}$$

Устойчивость схемы счета следует из устойчивости одномерных схем, т. е. необходимо, чтобы  $\mu_k > 1$ . Это выполняется при условии  $b > 0$ ;  $c > 0$ ;  $b > 1 + c$ . В системе I эти неравенства имеют место всегда, в системе II неравенства имеют место, если

$$l < 2B \left( l < \frac{2}{Pe} \right).$$

Однако схема (3.100) не обладает свойством полной аппроксимации. Поясним, что это значит. Уравнение (3.102) представим в виде

$$\begin{aligned}(E - \tau\Lambda_1) U^{k+\frac{1}{2}} &= U^k + \tau\omega^k, \\ (E - \tau\Lambda_2) U^{k+1} &= U^{k+\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

( $E$  — тождественный оператор). Исключим промежуточный шаг  $k + \frac{1}{2}$

$$(E - \tau\Lambda_1)(E - \tau\Lambda_2) U^{k+1} = U^k + \tau\omega^k$$

или

$$\frac{U^{k+1} - U^k}{\tau} = \Lambda_1 U^{k+1} + \Lambda_2 U^{k+1} + \psi^k - \tau\Lambda_1\Lambda_2 U^{k+1}. \quad (3.106)$$

Допустим, что достигнуто стационарное состояние, т. е.  $U = U^k = U^{k+1}$ . Тогда на основании (3.106)

$$\Lambda_1 U + \Lambda_1 U + \Psi - \tau\Lambda_1\Lambda_2 U = 0,$$

т. е. решается дифференциальная задача

$$L_1 U + L_2 U + \omega - \tau L_1 L_2 U = 0,$$

которая отличается от первоначально нестационарной задачи на величину  $\tau L_1 L_2 U$ , в результате чего мы должны стремиться к нулю шаг по временной координате даже тогда, когда переходные процессы нас не интересуют.

### Метод Писмана-Рэкфорда

Рассмотрим экономичную схему, основанную на методе Писмана-Рэкфорда:

$$\begin{aligned}\frac{U^{k+\frac{1}{2}} - U^k}{\tau} &= \Lambda_1 U^{k+\frac{1}{2}} + \Lambda_2 U^k + \omega^k, \\ \frac{U^{k+1} - U^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} &= \Lambda_1 U^{k+\frac{1}{2}} + \Lambda_2 U^{k+1} + \omega^{k+\frac{1}{2}},\end{aligned} \quad (3.107)$$

которая аппроксимирует дифференциальные уравнения на каждом полушаге. Граничные условия  $\lambda_1 U^{n+\frac{1}{2}} = 0$  и  $\lambda_2 U^{n+1} = 0$  представляют операторную запись условий (3.105). Из самих формул (3.107) видно, что стационарный режим не зависит от выбора  $\tau$ .

Последнее обстоятельство позволяет использовать временной шаг в качестве итерационного параметра при решении эллиптических задач  $GU + f = 0$  и тем самым сокращать время счета.

Уравнения (3.107) могут быть переписаны в виде:

$$\begin{aligned}a_i U_{i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} - b_i U_{ij}^{k+\frac{1}{2}} + c_i U_{i-1,j}^{k+\frac{1}{2}} &= -\omega_{i,j}^k, \\ i &= 1, \dots, n-1, \\ U_{0j}^{k+\frac{1}{2}} &= U_{1j}^{k+\frac{1}{2}}, \quad U_{nj}^{k+\frac{1}{2}} = \frac{U_{n-1,j}^{k+\frac{1}{2}} - \frac{h\gamma}{D} T_x}{1 + \frac{h\gamma}{D}}, \\ j &= 1, \dots, m-1,\end{aligned} \quad (3.108)$$

$$AU_{i,j+1}^{k+1} - B_1 U_{ij}^{k+1} + CU_{i,j-1}^{k+1} = -F_{i,j}^{k+\frac{1}{2}},$$

$$j = 1, \dots, m-1,$$

(3.109)

$$U_{i,j}^{k+1} = \frac{U_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}}{\text{Pe } l + 1}, \quad U_{i,m}^{k+1} = U_{i,m-1}^{k+1},$$

$$i = 1, 2, \dots, n-1,$$

где

$$a_i = \frac{\tau D}{h^2} \left( 1 + \frac{0,5}{i-0,5} \right), \quad b = \frac{2\tau D}{h^2}, \quad b_1 = 1 + b,$$

$$c_i = b - a_i;$$

$$A = \frac{\tau}{l} \left( \frac{1}{\text{Pe } l} - \frac{1}{2} \right), \quad B = \frac{2\tau}{\text{Pe } l^2}, \quad B_1 = 1 + B,$$

$$C = B - A;$$

$$\psi_{ij}^k = U_{ij}^k + AU_{ij}^k - BU_{ij}^k + C_{i,j-1}^k + \tau \omega_{ij}^k,$$

$$F_{ij}^{k+\frac{1}{2}} = U_{ij}^{k+\frac{1}{2}} + a_i U_{i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} - b U_{ij}^{k+\frac{1}{2}} + C_i U_{i-1,j}^{k+\frac{1}{2}} + \tau \omega_{ij}^{k+\frac{1}{2}}.$$

Напомним, что для уравнений материального баланса  $\gamma=0$ .

Для каждого фиксированного  $j$  решение линейных алгебраических уравнений (3.108) отыскивается с помощью прогоночных формул:

$$P_{i+1} = \frac{a_i}{b_i - c_i P_i}; \quad P_1 = 1 \quad (i = 1, \dots, n-1),$$

$$q_{i+1} = \frac{c_i q_i + \psi_{ij}^k}{b_i - c_i P_i}; \quad q_1 = 0 \quad (i = 1, \dots, n-1),$$

$$U_{ij}^{k+\frac{1}{2}} = P_{i+1} U_{i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} + q_{i+1,j}; \quad U_{nj}^{k+\frac{1}{2}} = \frac{\frac{\gamma h}{D} T_x + q_n}{1 + \frac{\gamma h}{D} - P_n}$$

$$(i = n-1, \dots, 0)$$

(радиальная прогонка).

Используя насчитанные  $U_{ij}^{k+\frac{1}{2}}$  для вычисления  $F_{ij}^{k+\frac{1}{2}}$  продольной прогонкой

$$P_{j+1} = \frac{A}{B_1 - CP_j}; \quad P_1 = \frac{1}{\text{Pe } l + 1} \quad (j = 1, \dots, m-1);$$

$$Q_{j+1} = \frac{CQ_j + F_{ij}^{k+\frac{1}{2}}}{B_1 - CP_j}; \quad Q_1 = 0 \quad (j = 1, \dots, m-1);$$

$$U_{ij}^{k+1} = P_{j+1} U_{i,j+1}^{k+1} + Q_{j+1}, \quad U_{i,m}^{k+1} = \frac{Q_m}{1 - P_m} \quad (j = m-1, \dots, 0)$$

$$(i = 1, \dots, n-1),$$

получим значения искомых сеточных функций на целом шаге. Затем переходим к расчету  $(k+2)$ -го временного слоя, и так далее до установления.

Рассмотренная методика применима лишь для задач с двумя пространственными переменными.

Для сравнения двух схем (3.102) и (3.107) был выбран следующий вариант для однокомпонентной реакции:

$$\omega_1 = k(1-x) \exp\left(\frac{T}{1+b_0 T}\right); \quad \omega_2 = \Delta T_{ad} \omega_1;$$

$$\Pi_D = \Pi_T = 10; \quad \text{Pe}_D = \text{Pe}_T = 50; \quad k = 0,1; \quad b_0 = 0,063;$$

$$\Delta T_{ad} = 20; \quad \gamma = 10; \quad T_x = 2;$$

Сетка  $n=9$ ;  $m=30$ . Чтобы получить решение сеточной задачи  $\lambda_1 U + \lambda_2 U + f = 0$  с тремя верными значащими цифрами, первым методом пришлось затратить 40 итераций, в то время как при счете по схеме (3.108), (3.109) — 18 итераций. Расчет проводился на вычислительной машине М-20 и занял 1 мин 5 сек машинного времени по схеме (3.108), (3.109).

### Общая задача в межтрубном пространстве с постоянными коэффициентами

Согласно общему подходу, перейдем к нестационарной задаче

$$\begin{aligned} \Pi_{Dl} \left( \frac{\partial^2 x_l}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial x_l}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 x_l}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{1}{\text{Pe}_{Dl}} \frac{\partial^2 x_l}{\partial z^2} - \frac{\partial x_l}{\partial \tau} + \\ + \omega_l(x_1, \dots, x_M, T) = \frac{\partial x_l}{\partial t}, \\ \Pi_T \left( \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{1}{\text{Pe}_T} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \frac{\partial T}{\partial \tau} + \\ + \Delta T_{ad_0} \omega_0(x_1, \dots, x_M, T) = \frac{\partial T}{\partial t} \end{aligned} \quad (3.110)$$

или в другом виде

$$D_l \left( \frac{\partial^2 U_l}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial U_l}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 U_l}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{1}{\text{Pe}_l} \frac{\partial^2 U_l}{\partial z^2} - \frac{\partial U_l}{\partial \tau} + \omega_l(U) = \frac{\partial U_l}{\partial t}, \quad (3.111)$$

где

$$U_l = x_l \quad (l = 1, \dots, M); \quad U_{M+1} = T;$$

$$\omega_{M+1} = \Delta T_{ad_0} \omega_0(U),$$

с граничными условиями: при  $\rho=r$

$$D_{M+1} \frac{\partial U_{M+1}}{\partial \rho} = \gamma(U_{M+1} - T_x); \quad \frac{\partial U_l}{\partial \rho} = 0 \quad (l = 1, \dots, M); \quad (3.112)$$

$$\text{при } \varphi = \frac{1}{\cos \varphi}$$

$$\frac{\partial U_l}{\partial n} = 0;$$

$$\text{при } \varphi = 0 \text{ и } \varphi = \frac{\pi}{6}$$

$$\frac{\partial U_l}{\partial \varphi} = 0;$$

при  $\xi=0$

$$\frac{\partial U_l}{\partial \xi} = \text{Pe}_l U_l;$$

при  $\xi=1$

$$\frac{\partial U_l}{\partial \xi} = 0 \quad (l = 1, \dots, M+1)$$

и начальными данными: при  $t=0$   $U=U_0$ . В этом случае интервал  $\tau$  разбиваем на 3 подынтервала и систему (3.111) запишем в виде

$$\begin{aligned} \frac{U_{ijk}^{n+\frac{1}{3}} - U_{ijk}^n}{\tau} &= \Lambda_1 U_{ijk}^{n+\frac{1}{3}} + \omega_{ijk}^n, \\ \frac{U_{ijk}^{n+\frac{2}{3}} - U_{ijk}^{n+\frac{1}{3}}}{\tau} &= \Lambda_2 U_{ijk}^{n+\frac{2}{3}}, \\ \frac{U_{ijk}^{n+1} - U_{ijk}^{n+\frac{2}{3}}}{\tau} &= \Lambda_3 U_{ijk}^{n+1}, \end{aligned} \quad (3.113)$$

где  $\Lambda_1$  и  $\Lambda_2$  — конечно-разностные операторы, описанные выше. Оператор  $\Lambda_3$

$$\Lambda_3 U = \frac{1}{\text{Pe}} \frac{U_{k+1} - 2U_k + U_{k-1}}{\Delta \xi^2} - \frac{U_{k+1} - U_k}{2\Delta \xi}$$

аппроксимирует дифференциальный оператор

$$L_3 U = \frac{1}{\text{Pe}} \frac{\partial^2 U}{\partial \xi^2} - \frac{\partial U}{\partial \xi}.$$

Распишем операторы  $\Lambda_1$ ,  $\Lambda_2$ ,  $\Lambda_3$  и проведем некоторые преобразования, в результате чего система (3.113) примет вид:

$$\begin{aligned} \text{I. } U_{i+1} - b_i U_i + U_{i-1} &= -\varphi_i, \\ \text{II. } U_{i+1} - B_i U_i + C_i U_{i-1} &= -\varphi_i, \\ \text{III. } U_{k+1} - B U_k + C U_{k-1} &= -\varphi_k, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} B &= \frac{2(\Delta \xi^2 \text{Pe} + 2\tau)}{\tau(2 - \Delta \xi \text{Pe})}, \\ C &= \frac{2 + \Delta \xi \text{Pe}}{2 - \Delta \xi \text{Pe}}, \\ \varphi_k &= \frac{2\Delta \xi^2 \text{Pe}}{\tau(2 - \Delta \xi \text{Pe})} U_k, \end{aligned}$$

и остальные коэффициенты описаны в (3.91). Решение систем I и II подробно изложено на стр. 99—103. К системе III выпишем граничные условия: при  $\xi=0$

$$\frac{U_1 - U_0}{\Delta \xi} = \text{Pe} U_0,$$

при  $\xi=1$

$$U_n = U_{n-1}$$

и рекуррентные соотношения:

$$\mu_0 = 1 + \Delta \xi \text{Pe}; \quad \mu_{k+1} = B - \frac{C}{\mu_k};$$



$$z_0 = 0, \quad z_{k+1} = \frac{\varphi_{k+1} + Cz_k}{\mu_{k+1}} \\ (k = 0, 1, \dots, n-2); \\ U_{n-1} = \frac{z_{n-1} \mu_{n-1}}{\mu_{n-1} - 1}, \quad U_k = \frac{U_{k+1}}{\mu_k} + z_k \\ (k = n-2, \dots, 1).$$

Для устойчивости счета к ошибкам округления необходимо, чтобы

$$\Delta \xi < \frac{2}{Pe},$$

где  $Pe$  — максимальное из всех  $Pe$ .

### Общая задача в круглой трубке с переменными коэффициентами

Нестационарный экзотермический контактный процесс описывается системой дифференциальных уравнений (см. уравнения (11) в табл. 1.1)

$$\nabla(D\nabla C) - \nabla(VC) + W(C, T) = \frac{\partial C}{\partial t},$$

$$\nabla(\lambda \nabla C) - \nabla(Vc_p T) + Q_0 W_0(C, T) = c_k \frac{\partial C}{\partial t}. \quad (3.114)$$

Здесь  $c_k$  — отношение теплоемкостей катализатора и газа. Перейдем в уравнении (3.114) к цилиндрическим координатам. По условию симметрии

$$\frac{\partial C}{\partial \varphi} = \frac{\partial^2 C}{\partial \varphi^2} = \frac{\partial T}{\partial \varphi} = \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} = 0.$$

Тогда уравнения (3.114) принимают вид:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D_r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial l} \left( D_l \frac{\partial C}{\partial l} \right) - \frac{\partial}{\partial l} (VC) + W(C, T) = \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (3.115)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial l} \left( \lambda_l \frac{\partial T}{\partial l} \right) - \frac{\partial}{\partial l} (Vc_p T) + Q_0 W_0(C, T) = c_k \frac{\partial T}{\partial t}.$$

Примем

$$U_l = C \quad (l = 1, \dots, N); \quad U_{N+1} = T; \quad D_{N+1} = \lambda; \quad V_{N+1} = Vc_p, \\ c_k = 1 \quad \text{для } U_l = C.$$

Решение системы уравнений (3.115) ищется в области  $0 \leq l \leq L$ ;  $0 \leq r \leq R_0$ . Пусть

$$\rho = \frac{r}{R_0} \quad \text{и} \quad \xi = \frac{l}{L}.$$

Тогда систему уравнений (3.115) после умножения на  $R_0^2$  можно записать в виде

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho D_l \frac{\partial U_l}{\partial \rho} \right) + \frac{R_0^2}{L^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( D_l \frac{\partial U_l}{\partial \xi} \right) - \frac{R_0^2}{L} \frac{\partial}{\partial \xi} (V_l U_l) - \\ - R_0^2 W_l = K_0^2 c_k \frac{\partial U_l}{\partial t}. \quad (3.116)$$

Ищется решение системы (3.116) в области  $\bar{D}$  ( $0 \leq \rho \leq 1$ ;  $0 \leq \xi \leq 1$ ;  $0 \leq t \leq \Theta$ ) с граничными условиями: а) при  $\rho=0$

$$\frac{\partial U_l}{\partial \rho} = 0;$$

при  $\rho=1$

$$D_l \frac{\partial U_l}{\partial \rho} = R_0 \alpha_0 (T_x - U_l) \text{ (для } U=C \alpha_0=0);$$

б) при  $\xi=0$

$$D_l \frac{\partial U_l}{\partial \xi} = L (V_l U_l - V_l U_l^0);$$

при  $\xi=1$

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} = 0,$$

и начальными данными: при  $t=0$   $U = U_n$ .

Заменим систему дифференциальных уравнений (3.116) системой конечно-разностных уравнений. Пусть  $l$ ,  $h$ ,  $\tau$  — приращения переменных  $\xi$ ,  $\rho$  и  $t$ , где

$$l = \frac{1}{n}, \quad h = \frac{2}{2m+1}$$

( $m$  и  $n$  — натуральные числа). Обозначим:

$$L_1 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho D \frac{\partial}{\partial \rho} \right),$$

$$L_2 = \frac{R_0^2}{L^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( D \frac{\partial}{\partial \xi} \right) - \frac{R_0^2}{L} \frac{\partial}{\partial \xi} (V).$$

Тогда систему (3.16) можно записать в виде

$$(L_1 + L_2) U - R_0^2 W(U) = R_0^2 c_k \frac{\partial U}{\partial t}. \quad (3.117)$$

Пусть  $\Lambda_1$  и  $\Lambda_2$  — разностные операторы, аппроксимирующие дифференциальные операторы  $L_1$  и  $L_2$ :

$$\begin{aligned} \Lambda_1 U &= \frac{1}{\rho_i} \left( \frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{2} \cdot \frac{D_{i+1} + D_i}{2} \cdot \frac{U_{i+1} - U_i}{h^2} - \frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{2} \times \right. \\ &\quad \left. \times \frac{D_i + D_{i-1}}{2} \cdot \frac{U_i - U_{i-1}}{h^2} \right), \\ \Lambda_2 U &= \frac{R_0^2}{L^2} \left( \frac{D_{j+1} + D_j}{2} \cdot \frac{U_{j+1} - U_j}{l^2} - \frac{D_j + D_{j-1}}{2} \cdot \frac{U_j - U_{j-1}}{l^2} \right) - \\ &\quad - \frac{R_0^2}{L} \left( \frac{V_j U_j - \Lambda_{j-1} U_{j-1}}{l} \right). \end{aligned}$$

Как показано в [3], разностные операторы  $\Lambda_1$  и  $\Lambda_2$  аппроксимируют дифференциальные операторы  $L_1$  и  $L_2$  с порядком  $h^2$  и  $l$  (порядок аппроксимации  $\Lambda_2$  понижается за счет второго члена оператора  $L_2$ : при аппроксимации второго члена  $L_2$  с порядком  $l^2$  при некоторых коэффициентах  $V$  разностная схема по пространственной переменной неустойчива).

С помощью разностных операторов можно систему уравнений (3.117) записать в виде

$$R_0^2 c_k \frac{U_{ij}^{k+1} - U_{ij}^k}{\tau} = (\Lambda_1 + \Lambda_2) U_{ij}^{k+1} - \Phi(\bar{U}_{ij}^k), \quad (3.118)$$

где  $\Phi = R_0^2 W$ . Разбиваем интервал  $\tau$  на 2 полуинтервала и запишем систему (3.118) в виде

$$\begin{aligned} \text{I)} \quad c_k R_0^2 \frac{U_{ij}^{k+\frac{1}{2}} - U_{ij}^k}{\tau} &= \Lambda_1 U_{ij}^{k+\frac{1}{2}} - \Phi_{ij}^k, \\ \text{II)} \quad c_k R_0^2 \frac{U_{ij}^{k+1} - U_{ij}^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} &= \Lambda_2 U_{ij}^{k+1}. \end{aligned} \quad (3.119)$$

Теперь на каждом полуинтервале будем решать одномерную алгебраическую задачу для трехточечного разностного уравнения. Решая последовательно системы уравнений I и II (3.119), переходим с целого шага  $t^k$  на шаг  $t^{k+1}$ .

Если из системы уравнений I и II (3.119) исключить значение функции  $U$  на полуинтервалах

$$U_{ij}^{k+\frac{1}{2}} = U_{ij}^{k+1} - \frac{\tau}{c_k R_0^2} \Lambda_2 U_{ij}^{k+1},$$

то система I и II (3.119) принимает вид

$$c_k R_0^2 \frac{U_{ij}^{k+1} - U_{ij}^k}{\tau} = (\Lambda_1 + \Lambda_2) U_{ij}^{k+1} - \Phi_{ij}^k - \frac{\tau}{c_k R_0^2} \Lambda_1 \Lambda_2 U_{ij}^{k+1}. \quad (3.120)$$

Как видно, (3.118) и (3.120) отличаются тем, что в (3.120) появляется слагаемое  $\frac{\tau}{c_k R_0^2} \Lambda_1 \Lambda_2 U_{ij}^{k+1}$ , но так как аппроксимация по времени

порядка  $\tau$ , то при достаточно малых  $\tau$  решения систем (3.118) и (3.120) будут мало отличаться. Но полной аппроксимации не будет. Это отмечалось выше при рассмотрении общей задачи с постоянными коэффициентами.

Выпишем операторы  $\Lambda_1$  и  $\Lambda_2$  в системе (3.119) в явном виде и поделим на коэффициент при  $U_{j+1}$  и  $U_{i+1}$ . Тогда система (3.119) принимает вид

$$\begin{aligned} \text{I)} \quad U_{i+1} - B_i U_i + A_i U_{i-1} &= -\Phi_i, \\ \text{II)} \quad U_{j+1} - B_j U_j + A_j U_{j-1} &= -\Phi_j, \end{aligned} \quad (3.121)$$

где

$$\begin{aligned} B_i &= 1 + \frac{\left(2 - \frac{1}{i}\right) h^2 R_0^2 c_k}{\tau (D_{i+1} + D_i)} + \frac{\left(1 - \frac{1}{i}\right) (D_i + D_{i-1})}{(D_{i+1} + D_i)}, \\ A_i &= \left(1 - \frac{1}{i}\right) \frac{D_i + D_{i-1}}{D_{i+1} + D_i}, \\ \Phi_i &= \frac{\left(2 - \frac{1}{i}\right) h^2 R_0^2 c_k}{\tau (D_{i+1} + D_i)} \left[ U_i - \frac{\tau \Phi}{R_0^2 c_k} \right], \end{aligned}$$

Напомним, что в  $A_i, B_i, \Phi_i$  входят  $D_r, \lambda_r$ , а в  $A_j, B_j, \Phi_j$  —  $D_l, \lambda_l$ .

Индексы  $k, j$  в системе I (3.121) и  $k, i$  в системе II (3.121) для удобства записи опущены. Добавим к системе I (3.121) начальные данные при  $t=0$   $U=U_0$  и граничные условия а) из (3.116), в которых производные заменены конечными разностями:

а) при  $\rho=0$   $U_0=U_1$ , при  $\rho=1$   $U_{lm}=U_{l,m+1}$  ( $l=1, \dots, N$ );

$$\frac{\lambda_{m+1} + \lambda_m}{2} \frac{U_{m+1} - U_m}{h} = R_0 \gamma (T_x - U_{m+1}).$$

К системе II (3.121) добавим граничные условия б) из (3.116), в которых производные тоже заменим конечными разностями:

б) при  $\xi=0$

$$U_0 = \frac{(D_0 + D_1) U_1 + U_0 L (V_0 + V_1)}{(D_0 + D_1) + L (V_0 + V_1)},$$

для  $U=T$

$$D_0 + D_1 = 2(\lambda_0 + \lambda_1); V_0 + V_1 = (V_0 + V_1)(c_{p0} + c_{p1}),$$

при  $\xi=1$

$$U_{n+1} = U_n.$$

Системы I и II (3.121) решаются методом прогонки. Рекуррентные соотношения имеют вид:

$$\begin{aligned} \mu_k &= \frac{1}{B_k - A_k \mu_{k-1}}, \\ z_k &= (z_{k-1} A_k + \Phi_k) \mu_k, \\ U_k &= U_{k+1} \mu_k + z_k, \end{aligned} \quad (3.122)$$

где  $k$  принимает значения  $i=1, \dots, m$  для системы I и  $j=1, \dots, n-1$  для системы II.

Из формул (3.122) и граничных условий а) определяем  $\mu_0=1$ ,  $z_0=0$ :

$$\begin{aligned} U_m &= \frac{z_m}{1 - \mu_m} \quad (\text{для } U=C), \\ U_m &= \frac{z_m [(\lambda_{m+1} + \lambda_m)/2 + R_0 h \gamma] + R_0 h \gamma T_x \mu_m}{(\lambda_{m+1} + \lambda_m)/2 + R_0 h \gamma - [(\lambda_{m+1} + \lambda_m)/2] \mu_m}. \end{aligned}$$

Из формул (3.122) и граничных условий б) определяем для уравнений II (3.121):

$$\begin{aligned} \mu_0 &= \frac{D_0 + D_1}{(D_0 + D_1) + L(V_0 + V_1)}, \\ z_0 &= \frac{U_0 L (V_0 + V_1)}{(D_0 + D_1) + L(V_0 + V_1)}, \quad U_{n-1} = \frac{z_{n-1}}{1 - \mu_{n-1}}. \end{aligned}$$

Для  $U=T$  в  $\mu_0$  и  $z_0$  вместо  $D_0 + D_1$  и  $V_0 + V_1$  будет  $(\lambda_0 + \lambda_1)$  и  $(V_0 + V_1)(c_{p0} + c_{p1})$ . При возрастании индекса  $k$  (прямая прогонка) вычисляются коэффициенты  $\mu_k$  и  $z_k$ ; при убывании индекса  $k$  (обратная прогонка) вычисляются функции  $U_k$  (т.е.  $c_k$  и  $T_k$ ).

### Процессы в слое идеального вытеснения

Если эффекты от диффузии и теплопроводности пренебрежимо малы [11], можно использовать модель слоя идеального вытеснения:

$$\frac{dx_l}{d\xi} = f_l(x_1, \dots, x_m, T),$$

$$\frac{dT}{d\xi} = \Delta T_{ад} f_0(x_1, \dots, x_m, T) - B(T - T_n),$$

Обычно это задачи с начальными условиями, для которых существуют надежные методы решения, например метод Рунге-Кутты.

Затруднения возникают при решении задач с граничными условиями на разных концах слоя. Так, автотермический процесс в аппарате с внутренним теплообменом описывается системой уравнений (см. (4), табл. 1.1):

$$\begin{aligned} \theta' + B(T - \theta) &= 0, \\ -T' + B(\theta - T) + \Delta T_{ад} f_0(x, T) &= 0, \\ -x' + f(x, T) &= 0 \end{aligned} \quad (3.123)$$

с краевыми условиями: при  $\xi=0$

$$T = 0; \quad x = x_n,$$

при  $\xi=1$

$$\theta = T_n.$$

(3.124)

Решение будем отыскивать релаксационным методом. С этой целью перейдем к нестационарному процессу:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t} &= \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + B(T - \theta), \\ \frac{\partial T}{\partial \xi} &= -\frac{\partial T}{\partial \xi} + B(\theta - T) + \Delta T_{ад} f_0(x, T), \\ \frac{\partial x}{\partial \xi} &= -\frac{\partial x}{\partial \xi} + f(x, T) \end{aligned} \quad (3.125)$$

с теми же граничными условиями (3.124) и начальными условиями: при  $t=0$

$$T = \theta = \theta_0; \quad x = x_0. \quad (3.126)$$

«Нестационарную» систему уравнений будем интегрировать до установления стационарного состояния.

В расчетах мы использовали неявную разностную схему первого порядка точности с обычной прямоугольной сеткой:

$$\xi_i = ih \quad (i = 0, 1, \dots, n); \quad t_k = k\tau \quad (k = 0, 1, \dots)$$

Решение разностной схемы (справа приведены схемы прямоугольной сетки).

$$\frac{\theta_i^{k+1} - \theta_i^k}{\tau} = \frac{\theta_{i+1}^{k+1} - \theta_{i+1}^k}{h} + B(T_i^k - \theta_i^{k+1}) \quad \begin{array}{c} (i, k+1) \\ \bullet \\ \bullet \\ (i, k) \end{array} \rightarrow (i+1, k+1)$$

$$(i = n-1, \dots, 0),$$

$$\frac{T_i^{k+1} - T_i^k}{\tau} = -\frac{T_i^{k+1} - T_{i-1}^{k+1}}{h} + B(\theta_i^{k+1} - T_i^{k+1}) + \Delta T_{\text{ал}, f_0}(x_i^k, T_i^k)$$

$$(i = 1, \dots, n), \quad \begin{array}{c} \bullet \\ \bullet \\ (i-1, k+1) \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \bullet \\ \bullet \\ (i, k+1) \end{array}$$

$$\frac{x_i^{k+1} - x_i^k}{\tau} = -\frac{x_i^{k+1} - x_{i-1}^{k+1}}{h} + f(x_i^k, T_i^k) \quad \begin{array}{c} \bullet \\ \bullet \\ (i-1, k+1) \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \bullet \\ \bullet \\ (i, k+1) \end{array}$$

$$(i = 1, \dots, n)$$

состоит в последовательном ( $k=0, 1, \dots$ ) выполнении цикла (A) — (B) — (C):

$$\theta_i^{k+1} = \frac{\theta_i^k + \frac{\tau}{h} \theta_{i+1}^{k+1} + B\tau T_i^k}{1 + \frac{\tau}{h} + B\tau}; \quad \theta_n^{k+1} = T_0 \quad (\text{A})$$

$$(i = n-1, \dots, 0),$$

$$T_i^{k+1} = \frac{T_i^k + \frac{\tau}{h} T_{i-1}^{k+1} + B\tau \theta_i^{k+1} + \tau \Delta T_{\text{ал}, f_0}(x_i^k, T_i^k)}{1 + \frac{\tau}{h} + B\tau}; \quad (\text{B})$$

$$T_0^{k+1} = \theta_0^{k+1} \quad (i = 1, \dots, n),$$

$$x_i^{k+1} = \frac{x_i^k + \frac{\tau}{h} x_{i-1}^{k+1} + \tau f(x_i^k, T_i^k)}{1 + \frac{\tau}{h}}; \quad x_0^{k+1} = x_0 \quad (\text{C})$$

$$(i = 1, \dots, n)$$

при следующих начальных данных:

$$x_i^0 = x_0; \quad \theta_i^0 = T_i^0 = T_0 \quad (0 \leq i \leq n).$$

Алгоритм счета ясен из самих формул: сначала по рекуррентному соотношению (A) справа налево насчитываются  $\theta_i^{k+1}$ , а затем, используя только что найденные значения функции  $\theta_i^{k+1}$ , по формулам (B) и (C) слева направо отыскиваются  $T_i^{k+1}$  и  $x_i^{k+1}$ .

Для анализа схемы на устойчивость предположим, что на каком-либо этапе счета допущена ошибка, в результате чего фактическое решение  $\tilde{\theta}_i^k$ ,  $\tilde{T}_i^k$ ,  $\tilde{x}_i^k$  будет отличаться от точного. Введем обозначения:

$$(e_1)_i^k = \theta_i^k - \tilde{\theta}_i^k; \quad (e_2)_i^k = T_i^k - \tilde{T}_i^k; \quad (e_3)_i^k = x_i^k - \tilde{x}_i^k;$$

$$\varepsilon^k = [(\varepsilon_1)_0^k, \dots, (\varepsilon_1)_n^k, (\varepsilon_2)_0^k, \dots, (\varepsilon_2)_n^k, (\varepsilon_3)_0^k, \dots, (\varepsilon_3)_n^k];$$

$$\|\varepsilon^k\| = \max_{0 \leq i \leq n} [|\varepsilon_1|_i^k, |\varepsilon_2|_i^k, |\varepsilon_3|_i^k];$$

$$a = \frac{\tau}{h}; \quad b = B\tau.$$

Тогда из (А) следует, что

$$(\varepsilon_1)_i^{k+1} = \frac{(\varepsilon_1)_i^k + a(\varepsilon_1)_{i+1}^k + b(\varepsilon_1)_i^k}{1+a+b}; \quad (3.127)$$

$$(\varepsilon_1)_n^{k+1} = 0 \quad (i = n-1, \dots, 0).$$

Так как коэффициенты  $a$  и  $b$  положительны, то

$$|(\varepsilon_1)_i^{k+1}| \leq \max [(\varepsilon_1)_i^k, (\varepsilon_2)_i^k, (\varepsilon_1)_{i+1}^{k+1}] \quad (i = n-1, \dots, 0). \quad (3.128)$$

Последнее неравенство при  $i=n-1$  вместе с (3.127) дает

$$|(\varepsilon_1)_{n-1}^{k+1}| \leq \|\varepsilon^k\|. \quad (3.129)$$

Далее из (3.128) при  $i=n-2$  и (3.129) следует:

$$|(\varepsilon_1)_{n-2}^{k+1}| \leq \|\varepsilon^k\|.$$

Повторяя этот процесс до  $i=0$ , получим:

$$|(\varepsilon_1)_i^{k+1}| \leq \|\varepsilon^k\| \quad (0 \leq i \leq n), \quad (3.130)$$

Разностные соотношения для  $\varepsilon_2$  имеют вид

$$\begin{aligned} (\varepsilon_2)_i^{k+1} &= \frac{1}{1+a+b} [(\varepsilon_2)_i^k + a(\varepsilon_2)_{i-1}^{k+1} + b(\varepsilon_1)_i^{k+1} + \\ &+ \tau \Delta T_{\text{ад}_0} \left( \frac{\partial f}{\partial x} (\varepsilon_2)_i^k + \frac{\partial \tilde{f}}{\partial T} (\varepsilon_2)_i^k \right)], \quad (3.131) \\ (\varepsilon_2)_0^{k+1} &= (\varepsilon_1)_0^{k+1} \quad (i = 1, \dots, n). \end{aligned}$$

Рассматривая их последовательно ( $i=1, 2, \dots, n$ ) и учитывая (3.130), получим:

$$|(\varepsilon_2)_i^{k+1}| < (1 + \tau \Delta T_{\text{ад}_0} S) \|\varepsilon^k\| \quad (0 \leq i \leq n), \quad (3.132)$$

где

$$S = \max \left( \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|, \left| \frac{\partial \tilde{f}}{\partial T} \right| \right).$$

Аналогичный анализ для  $\varepsilon_3$  дает

$$|(\varepsilon_3)_i^{k+1}| < (1 + \tau S) \|\varepsilon^k\|. \quad (3.133)$$

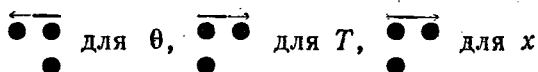
Поскольку неравенства (3.130), (3.132), (3.133) справедливы для любого  $i$ , то

$$\|\varepsilon^{k+1}\| < (1 + \tau S) \|\varepsilon^k\|,$$

где  $\Delta T_{\text{ад}_0} S = S$ .

Устойчивость схемы (А)—(В)—(С) доказана.

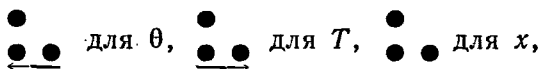
В работе [14] для расчетов предлагалась схема вида



с условием устойчивости

$$\tau > \frac{h}{1 - hB},$$

что не является обременительным. Но если производные по пространственной переменной заменить разностями на  $k$ -ом слое (явная схема)



то появится ограничение сверху на шаг по временной координате и время счета значительно увеличится.

Здесь не рассматриваются математические модели, описывающие подобные процессы при более сложных конструктивных решениях аппаратов [10], так как усложнение конструкции обычно приводит к увеличению числа уравнений в математическом описании, для расчетов которых применима указанная методика. В качестве примера можно привести алгоритм решения уравнений, описывающих автотермический процесс с двойными противоточными трубками. Схема процесса была приведена на рис. 1.3, математическое описание — уравнения (1.40). В соответствии с общим подходом перейдем к нестационарной задаче:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial t} &= -\frac{\partial x}{\partial \xi} + \omega(x, T), \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= -\frac{\partial T}{\partial \xi} + \Delta T_{ад} \omega(x, T) - B_1(T - \theta_1), \\ \frac{\partial \theta_1}{\partial t} &= \frac{\partial \theta_1}{\partial \xi} + B_1(T - \theta_1) - B_2(\theta_1 - \theta_2), \\ \frac{\partial \theta_2}{\partial t} &= -\frac{\partial \theta_2}{\partial \xi} + B_2(\theta_1 - \theta_2) \end{aligned} \quad (3.134)$$

с граничными и краевыми условиями: при  $\xi=0$

$$T = \theta_1, \quad \theta_2 = T_0, \quad x = x_0,$$

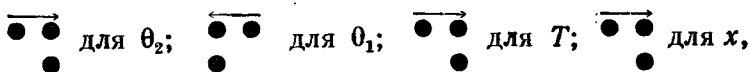
при  $\xi=1$

$$\theta_1 = \theta_2, \quad (3.135)$$

при  $t=0$

$$T = \theta_1 = \theta_2 = T_n; \quad x = x_0.$$

Используя неявную разностную схему



придем к следующей системе уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \theta_{2i}^{k+1} &= \frac{1}{1 + \frac{\tau}{h} + B_2 \tau} \left[ \theta_{2i}^k + \frac{\tau}{h} \theta_{2,i-1}^{k+1} + B_2 \tau \theta_{1i}^k \right]; \\ \theta_{20}^{k+1} &= T_0 \quad (i = 1, \dots, n), \end{aligned} \right\} \quad (a)$$



$$\left. \begin{aligned} \theta_{1i}^k &= \frac{1}{1 + \frac{\tau}{h} + B\tau} \left[ \theta_{1i}^k + \frac{\tau}{h} \theta_{2i}^{k+1} + \tau B_1 T_i^k + \tau B_2 \theta_{2i}^{k+1} \right]; \\ \theta_{1n}^{k+1} &= \theta_{2n}^{k+1}; B = B_1 + B_2 \quad (i = n-1, \dots, 0), \end{aligned} \right\} \quad (б)$$

$$\left. \begin{aligned} T_i^{k+1} &= \frac{1}{1 + \frac{\tau}{h} + B_1\tau} \left[ T_i^k + \frac{\tau}{h} T_{i-1}^{k+1} + \tau B_1 \theta_{1i}^{k+1} + \tau \Delta T_{ax} \omega(x_i^k, T_i^k) \right]; \\ T_0^{k+1} &= \theta_{10}^{k+1} \quad (i = 1, \dots, n), \end{aligned} \right\} \quad (в)$$

$$\left. \begin{aligned} x_i^{k+1} &= \frac{1}{1 + \frac{\tau}{h}} \left[ x_i^k + \frac{\tau}{h} x_{i-1}^{k+1} + \tau \omega(x_i^k, T_i^k) \right]; \\ x_0^{k+1} &= x_0 \quad (i = 1, \dots, n) \end{aligned} \right\} \quad (г)$$

при начальных данных:  $x_i^0 = x_0$ ,  $\theta_{1i}^0 = \theta_{2i}^0 = T_i^0 = T_n$  ( $0 \leq i \leq n$ ).

Алгоритм счета, как и в предыдущей задаче, состоит в последовательном просчете рекуррентных соотношений (а) слева направо, затем (б) справа налево и, наконец, (в) и (г) слева направо. Просчет временных слоев продолжается до установления стационарного состояния, т. е. до выполнения, например, условия

$$|T_i^{k+1} - T_i^k| < \epsilon,$$

где  $\epsilon$  — заданная точность «стабионирования» задачи.

Хотя выше было отмечено, что предлагаемые счетные схемы аппаратов с внутренним теплообменом устойчивы, иногда при счете могут появиться колебания. Их появление можно связать с колебательной неустойчивостью процесса в аппарате, т. е. причина неустойчивости заключается в физическом свойстве данной системы. Чтобы избежать этого, необходимо поставить перед временной производной от  $T$  коэффициент  $\beta > 1$ . Физически это будет означать, что рассматривается переходный процесс в аппарате со слоем катализатора, и коэффициент  $\beta$  равен отношению теплоемкостей катализатора и газа. Тогда тепловая емкость катализатора будет играть роль буфера в переходном режиме и колебания не возникнут. Значение  $\beta$  примерно равно 50—100 или больше. Надо сказать, что на скорость сходимости это влияет не сильно, так как можно увеличить шаг по времени  $\tau$  и довольно быстро добиться стационарного режима.

Аналогичным образом можно описать практически любую схему аппарата с внутренним теплообменом — при этом будут меняться число уравнений и граничные условия, что легко учесть, переходя к нестационарному процессу и используя сеточные методы. Порядок решения получающихся рекуррентных уравнений, как можно заметить из (А), (В), (С) или (а), (б), (в), (г), соответствует последовательности прохождения газа по элементам аппарата: трубки ( $\theta$ ) — катализатор ( $T, x$ ) в задаче (3.109) и внутренние трубки ( $\theta_2$ ) — наружные трубки ( $\theta_1$ ) — катализатор ( $T, x$ ) в задаче (3.134). Учитывая простоту получения счетных формул для подобных задач, программа расчета будет приведена только для первого случая.

Рассмотрим двухфазную модель псевдоожиженного слоя (см. уравнение (5) из табл. 1.1):

$$\left. \begin{aligned} \frac{dy_i}{d\xi} - wNu(x_i - y_i) &= 0, \\ \frac{1}{Pe_i} \frac{d^2x_i}{d\xi^2} - \frac{dx_i}{d\xi} - Nu(x_i - y_i) + \omega(x_1, \dots, x_n) &= 0, \end{aligned} \right\}$$

$$\xi = 0: y_i = 0, \frac{dx_i}{d\xi} = Pe_i x_i,$$

$$\xi = 1: \frac{dx_i}{d\xi} = 0$$

$$(i = 1, \dots, m).$$

После перехода к нестационарной задаче

$$\begin{aligned} \frac{\partial y}{\partial t} &= -\frac{\partial y}{\partial \xi} + wNu(x - y), \\ \frac{\partial x}{\partial t} &= \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x}{\partial \xi} + Nu(y - x) + \omega(x), \end{aligned} \quad (3.136)$$

$$\begin{aligned} \xi = 0: y &= 0; \frac{\partial x}{\partial \xi} = Pex, \\ \xi = 1: \frac{\partial x}{\partial \xi} &= 0 \end{aligned} \quad (3.137)$$

расчетная система уравнений должна быть дополнена начальными условиями, которые обычно выбирались следующим образом:

$$t=0: x=y=0. \quad (3.138)$$

Рассматриваемая задача (3.136), (3.137) является смешанной: первое из уравнений (3.136) — гиперболическое и второе — параболическое. В соответствии с рассматриваемыми методами сначала первое уравнение вычисляется по рекуррентным соотношениям, а затем краевая задача (второе уравнение) решается с использованием метода прогонки.

Здесь, как и в дальнейшем, рассматриваются однокомпонентные реакции, поскольку перенесение результатов на общий случай не вызывает затруднений.

На прямоугольной сетке

$$\xi_i = ih, \quad t_k = k\tau \quad (i = 0, \dots, n; \quad k = 0, 1, \dots)$$

уравнения (3.136) аппроксимируем неявной разностной схемой, заменяя первые производные по пространственной переменной левыми разностями. Тогда задачу приближенного интегрирования

$$\begin{aligned} \frac{y_i^{k+1} - y_i^k}{\tau} &= -\frac{y_i^{k+1} - y_{i-1}^{k+1}}{h} + wNu(x_i^k - y_i^k) \\ (i &= 1, \dots, n), \\ \frac{x_i^{k+1} - x_i^k}{\tau} &= \frac{1}{Pe} \frac{x_{i+1}^{k+1} - 2x_i^{k+1} + x_{i-1}^{k+1}}{h^2} + Nu(y_i^{k+1} - x_i^{k+1}) - \\ &\quad - \frac{x_i^{k+1} - x_{i-1}^{k+1}}{h} + \omega(x_i^k), \quad i = 1, \dots, n-1; \end{aligned} \quad (3.139)$$

$$y_0^{k+1} = 0, \quad \frac{x_1^{k+1} - x_0^{k+1}}{h} = \text{Pe} x_0^{k+1}, \quad x_n^{k+1} = x_{n-1}^{k+1}, \quad (3.140)$$

$$k = 0, 1, \dots,$$

$$y_i^0 = x_i^0 = 0, \quad 0 \leq i \leq n \quad (3.141)$$

представим в виде

$$y_i^{k+1} = \frac{1}{1+a+b} (y_i^{k+1} + a y_{i-1}^{k+1} + b x_i^k), \quad (3.142)$$

$$\begin{aligned} y_0^{k+1} &= 0, \quad i = 1, \dots, n, \\ A x_{i+1} - B x_i + C x_{i-1} &= -\varphi_i, \\ i &= 1, \dots, n-1 \end{aligned} \quad (3.143)$$

$$x_0 = \frac{x_1}{1 + \text{Pe}h}; \quad x_n = x_{n-1}$$

(верхний индекс  $k+1$  опущен), где

$$a = \frac{\tau}{h}, \quad b = \tau w \text{Nu};$$

$$A = \frac{\tau}{\text{Pe}h^2}, \quad B = 1 + \frac{2\tau}{\text{Pe}h^2} + \frac{\tau}{h} + \tau \text{Nu}, \quad C = \frac{\tau}{\text{Pe}h^2} + \frac{\tau}{h}.$$

Таким образом, переход с  $k$ -го временного слоя на  $(k+1)$ -ый осуществляется в два этапа: сначала по рекуррентной формуле (3.142) насчитываются  $y_i^{k+1}$ , после чего методом прогонки

$$P_{i+1} = \frac{A}{B - C P_i}, \quad P_1 = \frac{1}{\text{Pe}h + 1},$$

$$Q_{i+1} = \frac{C Q_i + \varphi_i}{B - C P_i}, \quad Q_1 = 0, \quad (3.144)$$

$$(i = 1, \dots, n-1);$$

$$x_i = P_{i+1} x_{i+1} + Q_{i+1}; \quad x_n = \frac{Q_n}{1 - P_n} \quad (3.144a)$$

решается система алгебраических уравнений (3.143). Данный цикл повторяется до тех пор, пока не будет достигнут стационарный режим.

Проведем беглый анализ схемы на устойчивость. Оператор перехода для ошибок имеет вид

$$(\varepsilon_1)_i^{k+1} = \frac{1}{1+a+b} [(\varepsilon_1)_i^k + a (\varepsilon_1)_{i-1}^{k+1} + b (\varepsilon_2)_i^k], \quad (3.145)$$

$$(\varepsilon_1)_0^{k+1} = 0; \quad i = 1, \dots, n;$$

$$\begin{aligned} A (\varepsilon_2)_{i+1}^{k+1} - B (\varepsilon_2)_i^{k+1} + C (\varepsilon_2)_{i-1}^{k+1} &= \\ = [(\varepsilon_2)_i^k + \tau \frac{\partial \varphi}{\partial x} (\varepsilon_2)_i^k + \tau \text{Nu} (\varepsilon_1)_i^{k+1}], \end{aligned} \quad (3.146)$$

$$(\varepsilon_1)_0^{k+1} = \frac{(\varepsilon_2)_1^{k+1}}{1 + \text{Pe}h}, \quad (\varepsilon_2)_n^{k+1} = (\varepsilon_2)_{n-1}^{k+1}.$$

Рассматривая соотношения (3.145) последовательно для  $i=1, 2, \dots, n$ , получим:

$$|(\varepsilon_1)_i^{k+1}| \leq \max_i [ |(\varepsilon_1)_i^k|, |(\varepsilon_2)_i^k| ] = \|\varepsilon^k\|. \quad (3.147)$$

Теперь с помощью теоремы 2, поскольку  $A, B, C > 0$ ;  $B = A + B + \delta$ ,  $\delta = 1 + \tau Nu$ , легко получить, что

$$\begin{aligned} |(e_2)_i^{k+1}| &\leq \frac{1}{\delta} [(\delta + \tau S) \max_i |(\tilde{e}_2)_i^k|, |(e_1)_i^{k+1}|] < \\ &< (1 + \tau S) \|e^k\|, \end{aligned} \quad (3.148)$$

а так как неравенства (3.147) и (3.148) справедливы для любого  $i$ , то  $\|e^{k+1}\| < (1 + \tau S) \|e^k\|$ .

Устойчивость доказана. Можно пытаться улучшить точность аппроксимации второго уравнения из (3.136), заменяя производную  $\frac{\partial x}{\partial t}$  центральными разностями, как это делалось в [14]. При этом на схему необходимо закладывать ограничение

$$h < \frac{2}{Pe}. \quad (3.149)$$

Однако такая замена имеет смысл при малых значениях  $Nu$  (и  $Pe$  из-за (3.149)), поскольку первое уравнение интегрируется с первым порядком точности и получающиеся здесь ошибки за счет члена  $Nu$  ( $y - x$ ) переносятся на решение второго уравнения.

Все сказанное ранее о преимуществе неявных разностных схем над явными остается в силе и в данном случае.

### ЛИТЕРАТУРА К ГЛАВЕ III

1. C. van Heerden. — Chem. Eng. Sci., 8, 133 (1958).
2. М. Г. Слинко. Кинетика и катализ, 1, 153 (1960).
3. В. К. Саульев. Интегрирование уравнений параболического типа методом сеток. М., Физматгиз, 1960.
4. С. К. Годунов, В. С. Рябенский. Введение в теорию разностных схем. М., Физматгиз, 1962.
5. Н. Н. Яненко. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск, «Наука», 1966.
6. D. W. Peasman, H. H. Rachford. — J. Soc. Industr. and Appl. Math., 3, 28 (1955).
7. J. Douglas. — J. Soc. Industr. and Appl. Math., 3, 42 (1955).
8. Н. Н. Яненко. — Докл. АН СССР, 134, 1034 (1960).
9. А. А. Самарский. Журнал вычислит. матем. и матем. физики, 2, 787 (1962).
10. Ю. А. Соколинский. Кинетика и катализ, 4, 910 (1963).
11. E. S. Lee. — Chem. Eng. Sci., 21, 143 (1966).
12. Г. И. Марчук. Расчет ядерных реакторов. Госатомиздат, 1961.
13. В. С. Бесков, В. А. Кузин, М. Г. Слинко. Хим. пром. № 7, 508 (1964).
14. В. А. Кузин. Сб. «Всесоюзная конференция по химическим реакторам». Новосибирск, изд. СО АН СССР, 1965, т. 3, стр. 471.

## ПРИЛОЖЕНИЯ

Публикуемые программы написаны на входном языке системы программирования «Альфа», который является конкретным представлением международного языка для описания алгоритмов Алгол-60\*. Особенности Альфа-языка излагаются в отчете \*\*. Здесь лишь дадим русский перевод служебных слов (в программе они выделены жирным шрифтом). В отличие от Алгола в Альфа-языке используются буквы русского и греческого алфавитов, хотя авторы стремились избегать этого.

В настоящее время осуществлен перевод всех программ на язык машины М-20 с помощью транслятора, разработанного в Вычислительном центре СО АН СССР. Качество автоматического программирования оказалось близким к ручному.

Дадим обзор действий, необходимых для того, чтобы программу на Алголе выполнить на машине.

Вначале на языке Алгол пишется исходная программа, представляющая собой алгоритм решения задачи, записанный в виде последовательности операторов Алгола. Программа без исходных данных переводится транслятором в рабочую программу, состоящую из элементарных команд той машины, на которой будет решаться задача. Во время этого перевода рабочая программа не выполняется, начальные данные не вводятся, результаты не выдаются на печать. Затем, когда программа выражена в терминах, «понятных» машине, она выполняется: вводятся начальные данные, выполняются вычисления и печатаются результаты. Транслятор, который сам представляет собой программу, во время выполнения рабочей программы не используется.

Ниже приведен список используемых служебных слов.

## СЛУЖЕБНЫЕ СЛОВА

<b>array</b>	— матрица	<b>amen</b>	— конец отладки
<b>array</b>	— вектор	<b>array</b>	— массив
<b>array</b>	— скаляр	<b>begin</b>	— начало
<b>after</b>	— после	<b>boolean</b>	— логический

\* Для ознакомления с языком Алгол-60 рекомендуем читателю следующую литературу: Лавров С. С. Универсальный язык программирования (Алгол-60). М., «Наука», 1964; Боттенбрух Г. Структура Алгол-60 и его использование. М., ИЛ, 1963; Мак-Кракен. Программирование на Алголе. М., «Мир», 1964.

\*\* А. П. Ершов, Г. И. Кожухин, Ю. М. Волошин. Входной язык для систем автоматического программирования. Новосибирск, 1964.

comment	— примечание
complex	— комплексный
do	— цикл
drum	— барабан
else	— иначе
end	— конец
false	— ложь
function	— функция
ident	— идентификатор
integer	— целый
own	— собственный
procedure	— процедура
repeat	— число повторений
replace	— заменить
result	— результат
for	— для

go to	— на
if	— если
label	— метка
print	— печать
real	— вещественный
step	— шаг
stop	— стоп
string	— строка
switch	— переключатель
tape	— лента
then	— то
times	— раз
true	— истина
until	— до
value	— значение
while	— пока

Ниже приведены программы для задач, алгоритмы решения которых были рассмотрены выше. Здесь описаны только основные программы. В случае необходимости программы для других задач могут быть составлены на основе описанных алгоритмов. Использование же языка Алгол, его подмножеств или других входных языков (автокоды, Фортран и т. д.) значительно облегчает программирование. Поэтому если, например, требуется решать задачу с большим числом одновременно протекающих реакций, то на основе описанных алгоритмов, используя структуру соответствующих программ, можно без особых затруднений составить программу для этой системы.

## § 1. ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ К ПРОГРАММАМ № 1—7

Прежде чем перейти к описанию алгоритмов на языке Алгол-60, сделаем несколько общих замечаний относительно структуры и использования программ.

1°. Как мы видели, метод решения любой дифференциальной задачи

$$Lu + Kf(U) = 0 \quad (4.1)$$

заключается в построении той или иной разностной схемы

$$L^{(h)}U + Kf(U) = 0, \quad (4.2)$$

решение которой уже не вызывает принципиальных затруднений и может осуществляться с помощью вычислительных машин.

При счете на машине по рабочей программе необходим следующий порядок исходного материала.

I. Параметры дифференциального оператора (4.1) и разностной схемы (4.2) — массив  $A[0:l]$  ( $l$  — число параметров), в последней задаче эти данные содержатся в массиве  $J$ ;

II. Параметры функции  $f(U)$  — массив  $B$ , в случае одного параметра — переменная  $bo$ .

Расположение материала в массивах  $A$  и  $B$  ясно из самих программ (см. часть программы "program" — "parameters" и описание процедуры  $F$ );

III. Параметры следующих вариантов, если  $A[0] > 0$  (когда  $A[0] \leq 0$ , просчитывается один вариант).

2°. Следующие переменные имеют один и тот же смысл во всех программах:

- $t$  — шаг по временной координате или по координате, играющей роль времени;
- $h$  — шаг по пространственной координате;
- $n$  — число отрезков (шагов), на которое разбивается интервал интегрирования по пространственной координате;
- $k, p$  — целые числа, которые выбираются из условий:  $k \times p = n$ ;
- $p+1$  — число точек временного слоя, выдаваемых на печать. Если значения функции в узлах данного слоя обозначить через  $U_i$  ( $i = 0, 1, \dots, n$ ), то печатаются  $U_i$  ( $j = 0, k, 2k, \dots, pk = n$ );
- $N_j$  — текущее число итераций (шагов по временной координате);
- $kN$  — число итераций, через которое массив результатов выдается на печать, т. е. результаты счета печатаются при  $N_j = kN, 2kN, \dots$
- $N_{\max}$  — ограничения на число итераций; при расчете стационарных режимов, когда выдача промежуточных результатов не требуется, следует положить  $kN = N_{\max}$ ;
- epsilon (или ерси) — используется для контроля процесса установления: если  $U^{k+1}$  и  $U^k$  — две последовательные итерации, то процесс считается установившимся, если выполняется условие  $|U^{k+1} - U^k| < \text{epsilon}$ ; при этом  $U^{k+1}$  выдается на печать, а программа переходит к счету следующего варианта или кончает работу, если  $A[0] \leq 0$ ; Res — массив результатов.

3°. Вычисление функции  $f(U)$  вынесено в процедуру  $F$ . То обстоятельство, что программы написаны для конкретных процессов, не является препятствием к их использованию для расчетов процессов с другими кинетическими выражениями, поскольку процедура  $F$  может содержать описание произвольной функции. Следует лишь помнить, что параметры функции  $f(U)$  вводятся в самой процедуре, а значения функции присваиваются переменной  $f$ .

4°. Если после расчета варианта оказывается, что  $A[0] > 0$ , то условный оператор с меткой «next variant» «организует» переход к счету очередного варианта по следующему правилу:

1. Вводится число  $i_1$ , указывающее положение первого параметра, который требуется заменить, в массиве  $A$ ;

1а. Вводится первый параметр  $R_L$  и выполняется оператор  $A[i_1] := R_1$ ;

2. Вводится номер второго параметра  $i_2$ ;

2а. Вводится сам параметр  $R_2$  и выполняется оператор  $A[i_2] := R_2$ ;

К. Вводится  $i_k < 0$  (допустим  $i_k = -1$ ), программа переходит к выполнению оператора с меткой «progam»; начинается счет варианта с параметрами, получившимися в результате такой замены. Таким образом, при переходе к счету последнего варианта необходимо, чтобы  $A[0]$  оказалось отрицательным.

5°. Число возможных вариантов, вообще говоря, не ограничено. Перед началом счета каждого варианта печатаются его параметры — массив  $A$  ( $J$  — в последней задаче).

6°. Программы, соответствующие неявным схемам, производят автоматический поиск оптимального шага по временной координате, если последний велик. Поэтому при расчетах стационарных режимов временной шаг следует брать завышенным.

При использовании для расчетов явных схем во избежание машинного «Авоста» следует выполнять условие устойчивости.

Программа № 1 осуществляет численное интегрирование уравнения

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial^2 x}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial x}{\partial \rho} + \frac{K}{D} f(x) \quad (4.3)$$

с граничными условиями

$$\left. \frac{\partial x}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0; \quad x|_{\rho=1} = xn \quad (4.4)$$

и начальными условиями

$$x|_{t=0} = xn \quad (4.5)$$

по явной схеме (3.33) — (3.35).

В программе № 2 для численного интегрирования системы (4.3), (4.4) используются неявная схема (3.48), (3.44), (3.45) и прогоночные формулы (3.52) — (3.54). Обе программы осуществляют решение соответствующих разностных уравнений «по шагам» вдоль временной координаты.

Через каждые  $kN$  шагов организована выдача на печать массива результатов:  $x_i^{Nj}$  ( $i=0, k, 2k, \dots, p \times k=n$ );  $N_j$ ;  $t$ . При счете по явной схеме последнее число не печатается.

Если в процессе счета ( $N_j=1, 2, \dots$ ) окажется, что выполнено условие

$$|x_0^{Nj} - x_0^{Nj-1}| < \text{epsilon},$$

то  $N_j$ -ый слой принимается за стационарный и выдается на печать.

Для иллюстрации построения процедуры  $F$  проводится ее описание для процесса  $\text{SO}_2 \rightarrow \text{SO}_3$ , кинетика которого описывается выражением

$$f(x) = \frac{\exp(-E/RT)}{a} \cdot \frac{1-x}{1-0,25x} \left[ \frac{\frac{2b}{a} - x}{\frac{2}{a} - x} - \left( \frac{x}{K_p(1-x)} \right)^2 \right].$$

### Программа № 1

начало массив  $A[0:9]$

целый  $i, k, p, m, n$

вещ  $D, K, xn, t, h, \text{epsilon}, N, kN, N_j, N_{\max}, m1, m2, f, R1, R2$ ;

kinetic:  $m:=1$ ; ввод ( $A$ );

program:  $D:=A[1]$ ;  $K:=A[2]$ ;  $xn:=A[3]$ ;

$t:=A[4]$ ;  $k:=A[5]$ ;  $p:=A[6]$ ;  $\text{epsilon}:=A[7]$ ;

$kN:=A[8]$ ;  $N_{\max}:=A[9]$ ; вывод ( $A$ );

parametors:  $N_j:=0.0$ ;  $N:=kN$ ;  $n:=k \times p$ ;

$h:=1.0/(n-0.5)$ ;  $m1:=t/(h \times h)$ ;  $m2:=t \times K/D$ ;  $R1:=1.0$

начало массив  $x[0:n]$ ,  $I[1:n]$ ,  $\text{Res}[1:p+2]$ ;

процедура  $F(x)$ ; начало собств вещь  $l, l1, l2, Kp$ ;

если  $m=1$  то на  $S1$  иначе на  $S2$ ;

$S1$  начало массив  $B[1:6]$ ; вещь  $T, E, R, a, b2$ ;

ввод ( $B$ );  $T:=B[1]$ ;  $E:=B[2]$ ;  $R:=B[3]$ ;  $a:=B[4]$ ;

$b2:=B[5]$ ;  $Kp:=B[6]$ ;  $l1:=b2/a$ ;  $l2:=2.0/a$ ;



$I := \exp(-E/(RT))/a$ ;  
 ввод (B);  $m := 2$  конец S1;  
 S2: начало вещ  $c1, c2$ ;  $c1 := 1.0 - x$ ;  $c2 := x/c1$ ;  
 $c3 := 1.0 - 0.25 \times x$ ;  
 $f := 1 \times c1/c3 \times ((I - x)/(12 - x) - (c2/Kp) \uparrow 2)$  конец S2;  
 $[x]0 := xn$ ; для  $i := 1$  шаг 1 до  $n$  цикл  
 начало  $x[i] := xn$ ;  $I[i] := 1.0/(R1 - 0.5)$ ;  $R1 := R1 + 1.0$  конец  
 layer:  $R1 := x[0]$ ; для  $i := 1$  шаг 1 до  $n - 1$  цикл  
 начало  $R2 := m1 \times (x[i+1] - 2 \times x[i] + R1 + 1[i] \times (x[i+1] - R1)) + x[i]$ ;  
 $R1 := x[i]$ ;  $F(R1)$ ;  $x[i] := R2 + m2 \times f$  конец;  
 $R1 := \text{abs}(x[1] - x[1])$ ;  $x[0] := x[1]$ ;  $Nj := Nj + 1.0$ ;  
 если  $R1 < \text{epsilon}$  то начало  $N := N_{\max}$ ; на print конец;  
 если  $Nj < N$  то на layer;  
 print:  $N := N + kN$ ; для  $i := 1$  шаг 1 до  $p + 1$  цикл  
 $\text{Res}[i] := xk \times (i - 1)$ ;  $\text{Res}[p+2] := Nj$ ; вывод (Res);  
 если  $N \leq N_{\max}$  то на layer конец;  
 next variant: если  $A[0] > 0.0$  то  
 начало M: ввод (i); если  $i < 0$  то на program;  
 ввод (R2);  $A[i] := R2$ ; на M конец вариантов;  
 конец\*

## Программа № 2

начало массив  $A[0:9]$ ;  
 целый  $i, k, p, m, n$ ;  
 вещ  $D, K, xn, t, h, \text{epsilon}, N, kN, Nj, N_{\max}$ ,  
 $f, m1, m2, R1, R2$ ;  
 kinetic:  $m := 1$ ; ввод (A);  
 program:  $D := A[1]$ ;  $K := A[2]$ ;  $xn := A[3]$ ;  $t := A[4]$ ;  
 $k := A[5]$ ;  $p := mA[6]$ ;  $\text{epsilon} := A[7]$ ;  $kN := A[8]$ ;  
 $N_{\max} := A[9]$ ; вывод (A);  
 parametors:  $Nj := 0.0$ ;  $N := kN$ ;  $n := k \times p$ ;  
 $h := 1.0/(n - 0.5)$ ;  $m1 := t/(h \times h)$ ;  $m2 := t \times K/D$ ;  
 начало массив  $x[0:n]$ ,  $P, Q, c, q[1:n]$ ,  $\text{Res}[1:p+3]$ ;  
 вещ  $b$ ; процедура  $F(x)$ ; значение  $x$ ;  
 начало собств вещ  $l, l1, l2, Kp$ ;  
 если  $m = 1$  то на S1 иначе на S2;  
 S1: начало массив  $B[1:6]$ ; вещ  $T, E, R, a, b2$ ;  
 ввод (B);  $T := B[1]$ ;  $E := B[2]$ ;  $R := B[3]$ ;  $a := B[4]$ ;  
 $b2 := B[5]$ ;  $Kp := B[6]$ ;  
 $l1 := b2/a$ ;  $l2 := 2.0/a$ ;  
 $I := \exp(-E/(RT))/a$ ;  
 вывод (B);  $m := 2$  конец S1;  
 S2: начало вещ  $c1, c2$ ;  
 $c1 := 1.0 - x$ ;  $c2 := x/c1$ ;  $c3 := 1.0 - 0.25 \times x$ ;  
 $f := 1 \times c1/c3 \times ((l1 - x)/(l2 - x) - (c2/Kp) \uparrow 2)$   
 конец S2; конец F;  
 $b := 1.0 + 2 \times m1$ ;  $p[1] := 1.0$ ;  $Q[1] := 0.0$ ;  
 $x[0] := x[1] := xn$ ;  $R1 := 1.0$ ;  
 для  $i := 1$  шаг 1 до  $n - 1$  цикл  
 начало  $x[i+1] := xn$ ;  $R2 := 1.0/(R1 - 0.5)$ ;  
 $c[i] := m1 \times (1.0 - R2)$ ;  $q[i] := 1.0/(b - c[i] \times P[i])$ ;  
 $P[i+1] := m1 \times (1.0 + R2) \times q[i]$ ;  $R1 := R1 + 1.0$  конец;

layer: для  $i := 1$  шаг 1 до  $n - 1$  цикл  
 начало  $F(x[i]); R2 := x[i] + m2 \times f;$   
 $Q[i+1] := (c[i] \times Q[i] + R2) \times q[i]$  конец;  
 для  $i := n - 1$  шаг  $-1$  до 1 цикл  
 $x[i] := P[i+1] \times x[i+1] + Q[i+1];$   
 $R1 := x[1] - x[0];$  если  $(x[1] \geq 1.0) \vee (R1 < 0.0)$  то  
 начало  $t := t + 2.0;$  на parameters конец;  
 $x[0] := x[1]; Nj := Nj + 1.0;$   
 если  $\text{abs}(R1) < \text{epsilon}$  то  
 начало  $N := N_{\max};$  на print конец;  
 если  $Nj < N$  то на layer;  
 print:  $N := N + kN;$   
 для  $i := 1$  шаг 1 до  $p + 1$  цикл  $\text{Res}[i] := x[k \times (i - 1)];$   
 $\text{Res}[p+2] := Nj; \text{Res}[p+3] := t;$  вывод (Res);  
 если  $N \leq N_{\max}$  то на layer конец;  
 next variant: если  $A[0] > 0.0$  то  
 начало  $M:$  ввод ( $i$ ); если  $i < 0$  то на program;  
 ввод ( $R2$ );  $A[i] := R2;$  на  $M$  конец вариантов; конец\*

### § 3. РАДИАЛЬНЫЙ ПЕРЕНОС В КРУГЛОЙ ТРУБКЕ

Программа № 3 предназначена для численного интегрирования уравнений вида

$$\frac{\partial x}{\partial \xi} = D \left( \frac{\partial^2 x}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial x}{\partial \rho} \right) + Kf(x, I), \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial I}{\partial \xi} = \lambda \left( \frac{\partial^2 I}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial I}{\partial \rho} \right) + \Delta T_{\text{ал}_0} Kf_0(x, T)$$

с краевыми условиями

$$\rho = 0: \quad \frac{\partial T}{\partial \rho} = \frac{\partial x}{\partial \rho} = 0;$$

$$\rho = 1: \quad \lambda \frac{\partial I}{\partial \rho} = \gamma (T_x - T); \quad \frac{\partial x}{\partial \rho} = 0; \quad (4.7)$$

$$\xi = 0: \quad T = x = 0$$

с помощью неявной схемы (3.94), (3.91), (3.92). Порядок расположения исходных данных в массиве  $A[0:11]$  следующий:

$$A[0] = \pm \text{const (см. § 1)}; A[1] - \lambda; A[2] - K;$$

$$A[4] - \gamma; A[5] - \Delta T_{\text{ал}_0}; A[6] - T_x;$$

$$A[7] - t \text{ (шаг по высоте слоя } - \Delta \xi);$$

$$A[8] - K;$$

$$K \times p = n;$$

$$A[9] - p.$$

$$A[10] - kN \text{ (используется для организации печати результатов на высотах } \xi = kN, 2 \times kN \dots);$$

$$A[11] - N_{\max} \text{ (ограничение по высоте слоя).}$$

Решение разностных уравнений осуществляется «по шагам» вдоль оси  $\xi$ . На высотах  $\xi = kN, 2kN$  организована печать массива результатов

$$T_i (i = 0, k, 2k, \dots, p \times k); 0; N_j$$

( $N_j$  — высота слоя).

Счет ограничен высотой  $N_{\max}$ . Если в ходе вычислений достигнут слой, на котором находится «горячая точка», то он выдается на печать, а программа переходит к расчету следующего варианта.

В качестве примера для построения процедуры выбрана функция

$$f = (1 - x) \exp\left(\frac{T}{b_0 \times T + 1}\right),$$

соответствующая реакции первого порядка.

### Программа № 3

```

начало массив  $A[0:11]$ 
целый  $i, k, p, m, n$ ;
вещественный  $\text{lamda}, D, K, \text{gamma}, \text{Tad},$ 
 $Tx, t, h, N, kN, N_{\max}, Nj, f, R1, R2$ ;
kinetic:  $m := 1$ ; ввод ( $A$ );
program:  $\text{lamda} := A[1]; D := A[2]; K := A[3];$ 
 $\text{gamma} := A[4]; \text{Tad} := A[5]; Tx := A[6];$ 
 $t := A[7]; k := A[8]; p := A[9]; kN := A[10];$ 
 $N_{\max} := A[11]$ ; вывод ( $A$ );
parameters:  $Nj := 0.0$ ;  $N := kN$ ;  $n := k \times p$ ;
 $h := 1.0 / (n - 0.5)$ ;
начало массив  $x, T[-1:n], P, Px, q, qx,$ 
 $c[1:n], \text{Res}[1:2 \times p + 5]$ ;
вещественный  $a, b, bx, L, Lx, lx, l1, l2, z$ ;
процедура  $F(x, T)$ ; значение  $x, T$ ;
начало собственный вещественный  $bo$ ;
на если  $m = 1$  то  $S1$  иначе  $S2$ ;
 $S1$ : ввод ( $bo$ );  $m := 2$ ; вывод ( $bo$ );
 $S2$ :  $f := (1.0 - x) \exp(T / (bo \times T + 1.0))$ 
конец;
 $R1 := h \times h / t$ ;  $L := R1 / \text{lamda}$ ;  $Lx := R1 / D$ ;
 $b := L + 2.0$ ;  $bx := Lx + 2.0$ ;  $z := t \times K$ ;
 $x[-1] := 0.0$ ;  $T[-1] := 0.0$ ;  $P[1] := 1.0$ ;
 $Px[1] := 1.0$ ;  $x[0] := x[1] := 0.0$ ;
 $T[0] := T[1] := 0.0$ ;  $R1 := 1.0$ ;
для  $i := 1$  шаг 1 до  $n - 1$  цикл
начало  $x[i+1] := 0.0$ ;  $c[i] := 1.0 - R2$ ;
 $R2 := 0.5 / (R1 - 0.5)$ ;  $c[i] := 1.0 - R2$ ;
 $q[i] := 1.0 / (b - c[i] \times P[i])$ ;
 $qx[i] := 1.0 / (bx - c[i] \times Px[i])$ ;
 $a := 1.0 + R2$ ;  $P[i+1] := a \times q[i]$ ;
 $Px[i+1] := a \times qx[i]$ ;  $R1 := R1 + 1.0$ 
конец;
 $R1 := \text{gamma} \times h / \text{lamda}$ ;
 $lx := 1.0 / (1.0 - Px[n])$ ;
 $l1 := 1.0 / (1.0 + R1 - P[n])$ ;  $l2 := R1 \times Tx$ ;
layer:  $R1 = T[0]$ ; для  $i := 1$  шаг 1 до  $n - 1$  цикл
начало  $F(x[i], T[i])$ ;  $f := z \times f$ ;
 $x[i-1] := (c[i] \times x[i-2] + Lx \times (x[i] + f)) \times$ 
 $\times qx[i]$ ;  $T[i-1] := (c[i] \times T[i-2] + Lx \times (T[i] + \text{Tad} \times f)) \times q[i]$ 
конец;
 $xn := x[n-2] \times lx$ ;  $T[n] := l1 \times (l2 + T[n-2])$ ;
для  $i := n - 1$  шаг -1 до 0 цикл

```

**начало**  $x[i] := Px[i+1] \times x[i+1] + x[i-1]$ ;  
 $T[i] := P[i+1] \times T[i+1] + T[i-1]$   
**конец**;  
 $Nj := Nj + t$ ; **если**  $T[0] - R1 < 0.0$  **то**  
**начало**  $N := N_{\max}$ ; **на print** **конец**  
**если**  $Nj < N$  **то на layer**;  
**print**:  $N := N + kN$ ;  
**для**  $i := 1$  **шаг** 1 **до**  $p+1$  **цикл**  
**начало** **целый**  $Z$ ;  $Z := k \times (i-1)$ ;  
 $\text{Res}[i] := T \ Z$ ;  $\text{Res}[i+(p+2)] := xZ$   
**конец**;  
 $\text{Res } 2 \times p + 5 := Nj$ ; **вывод** (Res);  
**если**  $N \leq N_{\max}$  **то на layer** **конец**;  
**next variant**: **если**  $A[0] > 0.0$  **то**  
**начало**  $M$ : **ввод** ( $i$ ); **если**  $i < 0$  **то**  
**на program**; **ввод** ( $R2$ );  
 $A[i] := R2$ ; **на**  $M$  **конец** **вариантов**; **конец**\*

#### § 4. ПРОДОЛЬНЫЙ ПЕРЕНОС

Программа № 4 предназначена для численного интегрирования системы уравнений

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{1}{\text{Pex}} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x}{\partial \xi} + K \times f(x, T),$$

$$q \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\text{Pe}} \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - \frac{\partial T}{\partial \xi} + \gamma (T_x - T) + T_{\text{ad}} \times K \times f(x, T)$$

с граничными условиями

$$\xi = 0: \quad \frac{\partial x}{\partial \xi} = \text{Pe}_x \times x, \quad \frac{\partial T}{\partial \xi} = \text{Pe} \times x,$$

$$\xi = 1: \quad \frac{\partial x}{\partial \xi} = \frac{\partial T}{\partial \xi} = 0$$

и начальными условиями

$$t=0: x=x_0, T=T_0$$

на базе неявной схемы второго порядка аппроксимации по пространственной переменной. Для реализации разностных уравнений вида (3.78) используются прогоночные формулы (3.82).

В ходе расчетов через каждые  $kN$  шагов ( $N = kN, 2kN, \dots$ ) организована выдача массива результатов:

$$T_i^{Nj} (i=0, k, 2k, \dots, p \times k = n); 0; x_i^{Nj} (i=0, k, \dots, p \times k); 0; N_j; t.$$

Процесс установления контролируется по значениям температуры на выходе из слоя.

Процедура  $F$  вычисляет функцию

$$f = (1 - x) \exp \left( \frac{T}{b_0 \times T + 1} \right).$$

#### Программа № 4

**начало** массив  $A[0:15]$ ;  
**целый**  $i, z, k, p, m, n$ ;  
**вещественный**  $\text{Pe}, \text{Pex}, K, \text{gamma}, T_{\text{ad}}, T_x, t, h$ ,  
 $N, kN, N_{\max}, Nj, \text{epsilon}, To, x_0, f, R1, R2, q$ ;

```

kinetic:  $m := 1$ ; ввод ( $A$ );
program:  $Pe := A[1]$ ;  $Pex := A[2]$ ;  $K := A[3]$ ;
gamma:  $= A[4]$ ;  $Tad := A[5]$ ;  $Tx := A[6]$ ;
 $t := A[7]$ ;  $k := A[8]$ ;  $p := A[9]$ ;  $kN := A[10]$ ;
 $N_{\max} := A[11]$ ; epsilon:  $= A[12]$ ;  $To := A[13]$ ;
 $x0 := A[14]$ ;  $q := A[15]$ ; вывод ( $A$ );
parametors:  $Nj := 0.0$ ;  $N := kN$ ;  $n := k \times p$ ;
 $h := 1.0/n$ ;  $z := 2 \times p + 6$ ;
начало массив  $T$ ,  $x[-1, n]$ ,  $P$ ,  $Px[1 : n]$ ,  $Res[1 : z]$ ;
вещественный  $b$ ,  $lx$ ,  $c$ ,  $cx$ ,  $L$ ,  $Lx$ ,  $l$ ,  $lx$ ,  $l1$ ,  $l2$ ;
процедура  $F(x, T)$ ; значение  $x$ ,  $T$ ;
начало собственный вещественный  $bo$ ;
на если  $m=1$  то  $S1$  иначе  $S2$ ;
 $S1$ : ввод ( $bo$ );  $m := 2$ ; вывод ( $bo$ );
 $S2$ :  $f := (1.0 - x) \times \exp(T/(bo \times T + 1.0))$ 
конец;
 $R1 := Pex \times h$ ;  $R2 := Pe \times h$ ;  $l1 := 2.0 - R1$ ;
 $l2 := 2.0 - R2$ ;  $cx := (2.0 + R1)/l1$ ;  $c := (2.0 + R2)/l2$ ;
 $Px[1] := cx/(1.0 + R1)$ ;  $P[1] := c/(1.0 + R2)$ ;
 $x[-1] := 0.0$ ;  $T[-1] := 0.0$ ;  $R1 := t/(R1 \times h)$ ;
 $R2 := t/(R2 \times h)$ ;  $Lx := 2.0/(R1 \times l1)$ ;
 $L := 2.0/(R2 \times l1)$ ;  $l2 := t \times \text{gamma}$ ;
 $bx := (1.0 + 2.0 \times R1) \times Lx$ ;  $b := (q + 2.0 \times R2 + l2) \times L$ ;
 $l1 := (l \times K)$ ;  $l2 := l2 \times Tx$ ;  $x[0] := x[1] := x0$ ;
 $T[0] := T[1] := To$ ;  $Res[p+2] := 0.0$ ;  $Res[z-2] := 0.0$ ;
для  $i := 1$  шаг 1 до  $n-1$  цикл
начало  $x[i+1] := x0$ ;  $T[i+1] := To$ ;
 $Px[i+1] := cx/(bx - Px[i])$ ;
 $P[i+1] := c/(b - P[i])$  конец;
 $lx := 1.0/(cx - Px[n])$ ;  $l := 1.0(c - P[n])$ ;
 $cx := 1.0/cx$ ;  $c := 1.0/c$ ;
layer: для  $i := 1$  шаг 1 до  $n-1$  цикл
начало  $F(x[i], T[i])$ ;  $f := f \times l1$ ;
 $x[i-1] := Px[i+1] \times (x[i-2] + lx \times (f + x[i]))$ ;
 $T[i-1] := P[i+1] \times (T[i-2] + L \times (Tad \times f + l2 + q \times T[i]))$ 
конец;
 $x[n] := x[n-1] := x[n-2] \times lx$ ;  $T[n-1] := T[n-2] \times l$ ;
 $R2 := adc(T[n-1] - T[n])$ ;  $T[n] := T[n-1]$ ;
если  $x[n] > 1.0$  то
начало  $t := t/2.0$  на parametors конец;
для  $i := n-2$  шаг -1 до 0 цикл
начало  $x[i] := (Px[i+1] \times x[i+1] + x[i-1]) \times cx$ ;
 $T[i] := (P[i+1] \times T[i+1] + T[i-1]) \times c$ 
конец;
 $Nj := Nj + 1.0$ ; если epsilon -  $R2 > 0.0$  то
начало  $N := N_{\max}$ ; на print конец;
если  $Nj < N$  то на layer;
print:  $N := +kN$ ;
для  $i := 1$  шаг 1 до  $p+1$  цикл
начало целый  $m$ ;
 $m := k \times (i-1)$ ;  $Res[i] := T[m]$ ;
 $Res[i+p+2] := x[m]$  конец;
 $Res[z-1] := Nj$ ;  $Res[z] := t$ ;
вывод (Res);
если  $N \leq N_{\max}$  то на layer

```

конец;  
 next variant: если  $A[0] > 0.0$  то  
 начало  $M$ : ввод ( $i$ ); если  $i < 0$  то на  
 program; ввод ( $R2$ );  $A[i] := R2$ ;  
 на  $M$  конец вариантов;  
 конец\*

## § 5. АППАРАТ С ВНУТРЕННИМ ТЕПЛООБМЕНОМ С ПРОСТЫМИ ПРОТИВОТОЧНЫМИ ТРУБКАМИ

Численное интегрирование системы уравнений

$$\begin{aligned}\frac{\partial Q}{\partial t} &= \frac{\partial Q}{\partial \xi} + B(T - Q), \\ \alpha \frac{\partial T}{\partial t} &= -\frac{\partial T}{\partial \xi} + B(Q - T) + T \operatorname{ad} f(x, T), \\ \frac{\partial x}{\partial t} &= -\frac{\partial x}{\partial \xi} + f(x, T)\end{aligned}$$

с граничными и начальными условиями

$$\begin{aligned}\xi = 0: \quad T &= Q, \quad x = x_n, \\ \xi = 1: \quad Q &= Q_n, \\ t = 0: \quad T &= Q = Q_n, \quad x = x_n\end{aligned}$$

основано на методике, рассмотренной в § 4 (программа № 5).

В процессе вычислений ( $N_i = 1, 2, 3$ ) через  $k$  шагов печатается  
 сив результатов

$$\begin{aligned}\{Q_i\}; 0; \{T_i\}; 0; \{x_i\}; 0; N_i; t \\ (i=0, k, 2k, \dots, k \times p = n)\end{aligned}$$

Контроль стационарирования решения осуществляется по значе  
 температуры  $T$  на выходе из слоя катализатора.

### Программа № 5

начало массив  $A[0: 11]$ ;  
 целый  $i, k, p, m, n, z, z1, z2, z3$ ;  
 вещественный  $B, T \operatorname{ad}, x_n, N, kN, a, Q_n, N_j$ ,  
 $N_{\max}$ , epsilon,  $t, h, f, \operatorname{ad}$ ;  
 kinetic:  $m := 1$ ; ввод ( $A$ );  
 program:  $B := A[1]$ ;  $T \operatorname{ad} := A[2]$ ;  $x_n := A[3]$ ;  
 $Q_n := A[4]$ ;  $kN := A[5]$ ;  $N_{\max} := [6]$ ;  
 epsilon :=  $A[7]$ ;  $t := A[8]$ ;  $k := A[9]$ ;  
 $p := A[10]$ ;  $a := A[11]$ ; вывод ( $A$ );  
 paramelors:  $N_j := 0.0$ ;  $N := kN$ ;  $\operatorname{ad} := T \operatorname{ad} / a$ ;  
 $n := p \times k$ ;  $h := 1.0 / n$ ;  $z1 := p + 2$ ;  
 $z2 := 2 \times z1$ ;  $z3 := 3 \times z1$ ;  $z := z3 + 2$ ;  
 начало массив  $Q, T, x[0: n]$ , Res[1: z];  
 вещественный  $r, r1, r2, r3, R1, R2, rT, rT1, rT2$ ,  
 процедура  $F(x, T)$ ; значение  $x, T$ ;  
 начало  
 конец;

```

r1:=t/n; r2:=t×B; R1:=1.0+r1; r3:=1.0/R1;
r:=1.0(R1+r2); rT1:=r1/a; rT2:=r2/a;
rT:=1.0/(1.0+rT1+rT2); Res[z1]:=0.0;
Rea[z2]:=0.0; Res[z3]:=0.0; R1:=Qn;
для i:=0 шаг 1 до n цикл
начало x[i]:=xn; Q[i]:=Qn; T[i]:=Qn;
конец;
layer: для i:=n—1 шаг —1 до 0 цикл
Q[i]:=r×(Q[i]+r1×Q[i+1]+r2×T[i]);
T[0]:=Q[0];
для i:=1 шаг 1 до n цикл
начало F(x[i], T[i]); f:=t×f;
x[i]:=r3(x[i]+r1×x[i—1]+f);
T[i]:=rT×(T[i]+rT1×T[i—1]+rT2×Q[i]+ad×f);
конец;
если x[n]>1.0 то
начало t:=t×0.5; на parameters
конец;
Nj:=Nj+1.0; R2:=abs(T[n]—R1);
R1:=T[n];
если R2<epsilon то
начало N:=Nmax; на print
конец;
если Nj<N то на layer;
print: N:=N+kN;
для i:=1 шаг 1 до p+1 цикл
начало целый r;
r:=k×(i—1); Res[i]:=Q[r];
Res[z1+i]:=T[r]; Res[z2+i]:=x[r]
конец;
Res[z3+1]:=Nj; Res[z3+2]:=t;
вывод (Res);
если N≤Nmax то на layer
конец;
next variant: если A[0]>0.0 то
начало M: ввод (i); если i<0 то
на program; ввод (R2); на M
конец;
конец*
```

## § 6. ДВУХФАЗНАЯ МОДЕЛЬ ПСЕВДООЖИЖЕННОГО СЛОЯ

Программа № 6 предназначена для численного интегрирования дифференциальных уравнений вида

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{1}{\text{Pe}} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x}{\partial \xi} + \text{Nu}(y-x) + Kf(x).$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -\frac{\partial y}{\partial \xi} + \frac{a}{1-a} \text{Nu}(x-y)$$

с граничными условиями

$$\xi = 0: \quad \frac{\partial x}{\partial \xi} = \text{Pe} \times x, \quad y = 0,$$

$$\xi = 1: \quad \frac{\partial x}{\partial \xi} = 0$$

и начальными условиями

$$t=0: y=x_0, x=x_0 \quad (0 \leq x_0 \leq 1) .$$

Алгоритм построен на основе неявной схемы с заменой производной  $\frac{\partial x}{\partial \xi}$  центральными разностями. В приложении даются необходимые изменения, которые следует внести в программу, чтобы получить схему, использующую левые разности для аппроксимации производной  $\frac{\partial x}{\partial \xi}$ .

При выполнении рабочей программы через каждые  $kN$  шагов происходит выдача на печать массива результатов

$$\{x_i^{Nj}\}; 0; \{\varphi_i^{Nj}\}; 0; ax_n^{Nj} + (1-a)y_i^{Nj}; Nj; t$$

$$(i=0, k, 2k, \dots, p \times k = n).$$

Контроль процесса установления осуществляется по значениям  $x$  на выходе из слоя катализатора.

Для иллюстрации построения процедуры выбрана функция

$$f = \left(\frac{1-x}{x}\right)^{0.8} \left[ \frac{2b/a - x}{2/a - x} - \frac{1}{(k_p)^2} \left(\frac{x}{1-x}\right)^2 \right].$$

Переменная  $a$ , встречающаяся в самой программе, никак не связана с аналогичной переменной в процедуре.

### Программа № 6

```
начало массив A[0:11];
целый i, z, k, p, m, n;
вещ Pe, K, Nu, a, w, epsi, xo, t, h, R1, R2, f,
    N, kN, Nmax, Nj;
kinetic: m:=1; ввод (A);
program: Pe:=A[1]; K:=A[2]; Nu:=A[3];
a:=A[4]; t:=A[5]; k:=A[6]; p:=A[7];
kN:=A[8]; Nmax:=A[9]; epsi:=A[10];
xo:=A[11]; вывод (A);
parameters: Nj:=0.0; N:=kN; n:=k×p;
h:=1.0/n; z:=2×p+7; w:=a/(1.0-a);
начало массив x, y [0:n], P, Q[1:n], Res[1:z];
вещ b, c, c1, Lx, Ly, l1, e, l1, m1, m2;
процедура F(x); значение x;
начало собственный вещ b1, b2, b3;
на если m=1 то S1 иначе S2;
S1: начало массив B[1:3]; вещ a, b21, Kp;
    ввод (B); a:=B[1]; b21:=B[2];
    Kp:=B[3]; b1:=b21/a; b2:=2.0/a;
    b3:=1.0/(Kp×Kp); вывод (B);
    m:=2 конец S1;
S2: начало вещ c1, c2;
    c1:=1.0-x; c2:=x/c1;
    f:=(c1/x) 10.8((b1-x/(b2-x)-b3×c2×c2)
конец S2;
конец F;
```



```

m1:=t×Nu; m2:=t×K; l1:=t/h; l2:=w×m1;
Ly:=1.0/(1.0+l1+l2); R1:=Pe×h; R2:=R1/l1;
c:=2.0-R1; Lx:=2.0×R2/c;
b:=Lx(1.0+2.0/R2+m1); R2:=2.0+R1;
c1:=c/R2; c:=R2/c; w:=1.0-a;
P[1]:=c/(1.0+R1); Q[1]:=0.0;
x[0]:=x[1]:=x0; y[0]:=y[1]:=0.0;
Res[p+2]:=0.0; Res[z-3]:=0.0;
для i:=1 шаг 1 до n-1 цикл
начало x[i+1]:=x0; y[i+1]:=0.0;
P[i+1]:=c/(b-P[i]);
конец цикла; e:=1.0/(c-P[n]);
layer: y[1]:=Ly×(y[1]+l2×x[1]);
для i:=1 шаг 1 до n-1 цикл
начало y[i+1]:=Ly×(y[i+1]+l1×y[i]+
+l2×x[i+1]);
F(x[i]); Q[i+1]:=P[i+1](Q[i]+Lx×(x[i]+m1×
y[i]+m2×f)) конец;
x[n-1]:=Q[n]×e; R2:=abs(x[n-1]-x[n]);
x[n]:=x[n-1];
если 1.0-x[n]<epsi то начало t:=0.5×t;
на parameters конец;
для i:=n-2 шаг -1 до 0 цикл
x[i]:=(P[i+1]×x[i+1]+Q[i+1])×c1;
Nj:=Nj+1.0; если epsi>R2 то
начало N:=Nmax; на print конец;
если Nj<N то на layer;
print: N:=N+kN;
для i:=1 шаг 1 до p+1 цикл
начало целый m; m:=k×(i-1);
Res[i]:=x[m]; Res[i+p+2]:=y[m];
конец; Res[z-2]:=a×x[n]+w×y[n];
Res[z-1]:=Nj; Res[z]:=t; вывод (Res);
если N≤Nmax то на layer; A[5]:=t
конец;
next variant: если A[0]>0.0 то
начало M: ввод (i); если i<0, то на
program; ввод (R2); A[i]:=R2; на M
конец вариантов;
конец*

```

Приложение к программе № 6

Строки программы 29, 30, 31 должны иметь вид:

```

c:=1.0+R1; Lx:=R2;
b:=1.0+c+R1×h×Nu+Lx;
c1:=1.0/c; w:=1.0-a

```

## § 7. ОБЩИЙ СЛУЧАЙ

(метод Писмана-Рэкфорда)

Программа № 7 предназначена для расчетов однокомпонентных экзотермических процессов в цилиндрическом слое катализатора, когда необходимо учитывать как продольный, так и радиальный перенос тепла и вещества.

Решение соответствующей данному случаю системы уравнений:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} + \frac{1}{\lambda} \left( \frac{1}{\text{Pe}} \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) + \frac{T_{\text{ad}}}{\lambda} Kf(x, T),$$

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial^2 x}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial x}{\partial \rho} + \frac{1}{D} \left( \frac{1}{\text{Pe}_x} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{D} Kf(x, T),$$

$$\rho = 0: \quad \frac{\partial T}{\partial \rho} = 0, \quad \frac{\partial x}{\partial \rho} = 0,$$

$$\rho = 1: \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial \rho} = \gamma (T_x - T), \quad \frac{\partial x}{\partial \rho} = 0,$$

$$\xi = 0: \quad \frac{\partial T}{\partial \rho} = \text{Pe} \cdot T, \quad \frac{\partial x}{\partial \xi} = \text{Pe}_x \cdot x,$$

$$\xi = 1: \quad \frac{\partial T}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial x}{\partial \xi} = 0,$$

$$t = 0: \quad T = T_n, \quad x = x_n$$

основывается на методе Писмана-Рэкфорда (§ 3).

Поясним значения некоторых переменных, встречающихся в данной программе впервые:

$n, m$  — число отрезков, на которое разбиваются интервалы интегрирования по пространственным переменным  $\rho$  и  $\xi$  соответственно;

$k1, p1, k2, p2$  — определяются соотношениями

$$k1 \times p1 = n, \quad k2 \times p2 = m,$$

$$la - \lambda, \quad ga - \gamma.$$

В процессе вычислений ( $N_l = 1, 2, \dots$ ) через каждые  $kN$  шагов на печать выдаются:

1) двумерный массив Res

$$T_{i,l}^{N_l} \quad (i=0, k1, 2 \times k1, \dots, p1 \times k1 = n)$$

для

$$l=0, k2, 2 \times k2, \dots, p2 \times k2 = m;$$

2) двумерный массив Res  $x$

$$x_{i,l}^{N_l} \quad (i=0, k1, \dots, p2 \times k1 = n);$$

для

$$l=0, k2, \dots, p2 \times k2 = m;$$

3)  $N_l$  — число просчитанных слоев;

4)  $t$  — шаг по времени, с которым осуществляется счет.

Здесь  $T_{i,l}^{N_l} (x_{i,l}^{N_l})$  — значение температуры (степени превращения) в узле:

$$(\rho_i \xi_l t_{N_l}) = [(i - 0,5) \times \Delta \rho; \quad l \times \Delta \xi; \quad \Delta t \times N_l].$$

Если при просчете очередного  $N_l$ -го слоя оказывается, что

$$|T_{0,m}^{N_l} - T_{0,m}^{N_l-1}| > \text{epsi},$$

то последние результаты принимаются за искомый установившийся режим и выдаются на печать, а программа переходит к счету следующего варианта или прекращает работу, если  $G[0] < 0$ .

В заключение отметим, что процедура  $F$  построена для функции

$$f = (1 - x) \times \exp\left(\frac{T}{b_0 \times T + 1}\right).$$

### Программа № 7

```

начало массив 1[0 : 18];
целый  $n, m, k1, p1, k2, p2, s, i, j$ ;
вещ  $la, D, Pe, Pex, K, Tad, ga, Tx, xn,$ 
 $Tn, \text{epsi}, t, h1, h2, Nj, N, kN, N_{\max}, f, R1, R2, R3$ ;
kinetic:  $s := 1$  ввод ( $I$ );
program:  $la := I[1]$ ;  $D := I[2]$ ;  $Pe := I[3]$ ;
 $Pex := I[4]$ ;  $K := I[5]$ ;  $Tad := I[6]$ ;  $ga := I[7]$ ;
 $Tx := I[8]$ ;  $k1 := I[9]$ ;  $p1 := I[10]$ ;  $k2 := I[11]$ ;  $p2 := I[12]$ ;
 $t := I[13]$ ;  $kN := I[14]$ ;  $N_{\max} := I[15]$ ;  $xn := I[16]$ ;
 $Tn := I[17]$ ;  $\text{epsi} := I[18]$ ; вывод ( $I$ );
parameters:  $Nj := 0.0$ ;  $N := kN$ ;  $n := k1 \times p1$ ;
 $m := k2 \times p2$ ;  $h1 := 1.0(n - 0.5)$ ;  $h2 := 1.0/m$ ;
начало массив  $x, T[0 : m, 0 : n], q, qx[1 : n + 1],$ 
 $p, pq, a, c[1 : n], Q, Qx[1 : m + 1], P, Px, PQ, PQx[1 : m],$ 
 $Res, Res\ x[0 : p2, 0 : p1]$ ;
вещ  $b, b1, A, B, B1, C, Ax, Bx, Bx1, Cx,$ 
 $L, Lx, lx, l1, l2, l3, mx, m1$ ;
процедура  $F(x, T)$ ; значение  $x, T$ ;
начало собственный вещ  $bo$ ;
если  $s = 2$  то на  $S$ ;
ввод ( $bo$ );  $s := 2$ ; вывод ( $bo$ );
 $S: f := (1 - x) \times \exp(T / (1.0 + bo \times T))$ 
конец;
 $R1 := t \times K$ ;  $L := R1 \times Tad / la$ ;  $Lx := R1 / D$ ;
 $R1 := t / (h1 \times h1)$ ;  $b := 2 \times R1$ ;  $b1 := 1.0 + b$ ;
 $p[1] := 1.0$ ;  $q[1] := 0.0$ ;  $qx[1] := 0.0$ ;  $R2 := 1.0$ ;
для  $i := 1$  шаг 1 до  $n - 1$  цикл
начало  $R3 := 0.5 / (R2 - 0.5)$ ;  $a[i] := R1 \times (1.0 + R3)$ ;
 $c[i] := b - a[i]$ ;  $pq[i] := 1.0 / (b1 - c[i] \times p[i])$ ;
 $p[i + 1] := a[i] \times pq[i]$ ;  $R2 := R2 + 1.0$ 
конец;
 $R1 := ga$ ;  $h1 / la$ ;  $R2 := 1.0 - p[n]$ ;  $lx := 1.0 / R2$ ;
 $l1 := 1.0 / (R2 + R1)$ ;  $l2 := R1 \times Tx$ ;  $l3 := 1.0 / (1 + R1)$ ;
 $R3 := t / h2$ ;  $R1 := Pe \times h2$ ;  $R2 := R3 / la$ ;
 $P[1] := 1.0 / (R1 + 1.0)$ ;  $Q[1] := 0.0$ ;  $A := R2 \times (1.0 / R1 - 0.5)$ ;
 $B := 2 \times R2 / R$ ;  $B1 := 1.0 + B$ ;  $C := B - A$ ;
 $R1 := Rex \times h2$ ;  $Px[1] := 1.0 / (R1 + 1.0)$ ;  $Qx[1] := 0.0$ ;
 $R2 := R3 / D$ ;  $Ax := R2 \times (1.0 / R1 - 0.5)$ ;  $Bx := 2 \times R2 / R1$ ;
 $Bx1 := 1.0 + Bx$ ;  $Cx := Bx - Ax$ ;
для  $j := 1$  шаг 1 до  $m - 1$  цикл
начало  $PQ[j] := 1.0 / (B1 - C \times P[j])$ ;  $P[j + 1] := A \times PQ[j]$ ;
 $PQx[j] := 1.0 / (Bx1 - Cx \times Px[j])$ ;  $Px[j + 1] := Ax \times PQx[j]$ 
конец;
 $m1 := 1.0 / (1.0 - P[m])$ ;  $mx := 1.0 / (1.0 - Px[m])$ ;
для  $j := 0$  шаг 1 до  $m$  цикл

```

начало для  $i := 0$  шаг 1 до цикл  
 начало  $T[j, i] := Tn$ ;  $x[j, i] := xn$  конец  
 конец;  
 layer: для  $i := 0$  шаг 1 до  $n - 1$  цикл  
 начало  $q[i+2] := T[0, i]$ ;  $qx[i+2] := x[0, i]$  конец;  
 для  $j := 1$  шаг 1 до  $m - 1$  цикл  
 начало для  $i := 1$  шаг 1 до  $n - 1$  цикл  
 начало  $F(x[j, i], T[j, i])$ ;  $q[i+1] := c[i] \times q[i] +$   
 $T[j, i] + A \times T[j+1, i] - B \times T[j, i] + C \times q[i+2] +$   
 $L \times j) \times pq[i]$ ;  $qx[i+1] := (c[i] \times qx[i] + x[j, i] +$   
 $+ Ax \times x[j+1, i] - Bx \times x[j, i] + Cx \times qx[i+2] +$   
 $+ Lx \times f) \times pq[i]$ ;  
 конец;  $T[j, n] := (l2 + q[n]) \times l1$ ;  $x[j, n] := qx[n] \times lx$ ;  
 для  $i := n - 1$  шаг  $-1$  до 0 цикл начало  
 $q[i+2] := T[j, i]$ ;  $T[j, i] := p[i+1] \times T[j, i+1] + q[i+1]$   
 $qx[i+2] := x[j, i]$ ;  $x[j, i] := p[i+1] \times x[j, i+1] + qx[i+1]$  конец  
 конец;  
 если  $x[m-1, 0] > 1.0$  то начало  $t := t/2$ ; на parameters  
 конец;  
 для  $j := 0$  шаг 1 до  $m - 1$  цикл  
 начало  $Q[j+2] := T[j, 0]$ ;  $Qx[j+2] := x[j, 0]$  конец;  
 для  $i := 1$  шаг 1 до  $n - 1$  цикл  
 начало для  $j := 1$  шаг 1 до  $m - 1$  цикл  
 начало  $F(x[j, i], T[j, i])$ ;  $Q[j+1] := (C \times Q[j] + T[j, i] +$   
 $a[i] \times T[j, i+1] - b \times T[j, i] + c[i] \times Q[j+2] + L \times f) \times PQ[j]$ ;  
 $Qx[j+1] := (Cx \times Qx[j] + x[j, i] +$   
 $a[i] \times x[j, i] - b \times x[j, i] + c[i] \times Qx[j+2] + Lx \times f) \times PQx[j]$   
 конец;  $T[m, i] := Q[m] \times m1$ ;  $x[m, i] := Qx[m] \times mx$ ;  
 если  $x[m, i] > 1.0$  то  
 начало  $t := t/2$ ; на parameters  
 конец;  
 для  $j := m - 1$  шаг  $-1$  до 0 цикл  
 начало  $Q[j+2] := T[j, i]$ ;  $T[j, i] := P[j+1] \times T[j+1, i] + Q[j+2]$   
 $Qx[j+2] := x[j, i]$ ;  $x[j, i] := Px[j+1] \times x[j+1, i] + Qx[j+1]$ ;  
 конец;  
 конец;  $Nj := Nj + 1.0$ ;  $R1 := \text{abs}(T[m-1, 1] - q[3])$ ;  
 если  $R1 \text{ epsi}$  то  
 начало  $N := N_{\max}$ ; на print  
 конец;  
 если  $Nj < N$  то на layer;  
 print:  $N := N + kN$ ;  
 для  $j := 0$  шаг 1 до  $p2$  цикл  
 начало целый  $p, q$ ;  $p := k2 \times j$ ;  
 $\text{Res}[j, 0] := T[p, 1]$ ;  $\text{Res } x[j, 0] := x[p, 1]$ ;  
 для  $i := 1$  шаг 1 до  $p1 - 1$  цикл начало  
 $q := k1 \times i$ ;  $\text{Res}[j, i] := T[p, q]$ ;  $\text{Res } x[j, i] := x[p, q]$   
 $\text{Res}[j, p1] := T[p, n-1] + l2) \times l3$ ;  $\text{Res } x[j, p1] := x[p, n-1]$   
 конец; вывод ( $\text{Res}, \text{Res } x, Nj, t$ );  
 если  $N \leq N_{\max}$  то на layer  
 конец  
 next variant; если  $I[0] > 0.0$  то  
 начало  $M$ : ввод ( $i$ ); если  $i < 0$  то на program;  
 ввод ( $R2$ );  $I(i) := R2$ ; на  $M$   
 конец вариантов;  
 конец\*

## § 8. ОБЩИЙ СЛУЧАЙ

(метод дробных шагов)

Следующие три программы (№ 8—10) имеют общую структуру, несколько отличную от предыдущих.

В программе № 8 вычисляются значения  $T$ ,  $x$ , удовлетворяющие системе уравнений

$$D_R \left( \frac{\partial^2 x}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial x}{\partial \rho} \right) + D_A \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x}{\partial \xi} + W(x, T) = \frac{\partial x}{\partial t},$$

$$T_R \left( \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) + T_A \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - \frac{\partial T}{\partial \xi} + Q_p W(x, T) = \frac{\partial T}{\partial t}$$

с граничными условиями:

$$\text{при } \rho = 0 \quad \frac{\partial x}{\partial \rho} = \frac{\partial T}{\partial \rho} = 0,$$

$$\text{при } \rho = 1 \quad \frac{\partial x}{\partial \rho} = 0; \quad T_R \frac{\partial T}{\partial \rho} = \gamma (T_x - T),$$

$$\text{при } \xi = 0 \quad P_A \frac{\partial x}{\partial \xi} = x; \quad T_A \frac{\partial T}{\partial \xi} = T,$$

$$\text{при } \xi = 1 \quad \frac{\partial T}{\partial \xi} = 0; \quad \frac{\partial x}{\partial \xi} = 0$$

и начальными данными: при  $t=0$ ,  $x=T=0$ . Вводимые параметры:

$m$  — число точек по радиусу;

$n$  — число точек по оси;

$d$  — число итераций (это число желательно задавать достаточно большим, так как через указанное число итераций программа прекращает работу. Если последующие итерации отличаются от предыдущей меньше чем на  $e$ , то машина прекращает итерации, выводит результаты и останавливается, хотя фактическое число итераций меньше, чем  $d$ ).

$DR, TR, DA, TA$  — коэффициенты системы;

$t$  — шаг по времени;

$\gamma$  — обозначение коэффициента;

$QP$  — коэффициент при  $W(x, T)$ ;

$e$  — точность итерации;

$T0$  — температура холодильника;

$\rho$  — любое число, не равное 0. Задается для ввода параметров функции  $W(x, T)$ .

В конце работы программы выводятся:

$R$  — число итераций, через которое происходит выдача результатов (машина это число увеличивает на 1);

$l$  — шаг по оси;

$k$  — шаг по оси  $\rho$ ;

$DR, TR, DA, TA, t$ ,

$\gamma, QP, l, T0$  — описаны выше;

$H$  — фактическое максимальное отклонение

$$|x_{ji}^k - x_{ji}^{k-1}|;$$

$L$  — фактическое максимальное отклонение

$$|T_{ij}^k - T_{ij}^{k-1}|,$$

где  $i=1, \dots,$

$j=1, \dots, n-1$ ;  $m$  — узлы сетки;

$k-1, k$  — предыдущая и последующая итерации;

Последними выводятся  $x_{ji}$ ,  $T_{ji}$ . Порядок их выдачи следующий:

$$i=1, \dots, m; \quad j=1, \dots, n-1,$$

где  $x_{ji}$ ,  $T_{ji}$  — значение сеточной функции в узле

$$(j, i) = (jl, (i - 1/2)h).$$

При выборе числа точек  $n$  необходимо помнить, что

$$\frac{1}{n} < 2D_A \text{ и } \frac{1}{n} < 2 \cdot T_A.$$

Вид функции  $W(x, T)$  в программе можно менять, изменив соответствующий блок программы:

кинетика: **начало**  
**конец**

### Программа № 8

**начало**

целые  $i, j, d, n, m, k$ ;  
вещественные  $DR, TR, DA, TA, t, p, QP, \text{gamma},$   
 $T0, B, C, Z, Z1, W, f, e, L, L1, H, H1, l, h$ ;  
ввод  $(m, n, d, DR, TR, DA, TA, t, \text{gamma}, QP, e, o, p)$ ;

**начало**

массив  $X, T[1:n-1, 1:m], D, D1[0:m],$   
 $G, G1, U, U1[0:n-1];$

$L := 1/n; h := 2/(2 \times m + 1);$

для  $j := 1, \dots, n-1$  цикл

для  $i := 1, \dots, m$  цикл

$X[j, i] := T[j, i] := 0;$

$D[0] := 1; D1[0] := 1;$

для  $i := 1$  шаг 1 до  $m$  цикл

**начало**

$B := (2 \times i - 1)/i; C := (i - 1)/i;$

$D[i] := B \times (h \uparrow 2 / (2 \times t \times DR) + 1) - C/D[i-1];$

$D1[i] := B \times (h \uparrow 2 / (2 \times t \times TR) + 1) - C/D1[i-1]$

**конец;**

$B := 2 \times (l \uparrow 2 + 2 \times t \times DA) / (t \times (2 \times DA - l));$

$C := (2 \times DA + l) / (2 \times DA - l);$

$Z := 2 \times (l \uparrow 2 + 2 \times t \times TA) / (t \times (2 \times TA - l));$

$Z1 := (2 \times TA + l) / (2 \times TA - l);$

$G[0] := (DA + l)/DA; G1[0] := (TA + l)/TA;$

для  $j := 1$  шаг 1 до  $n-1$  цикл

**начало**

$G[j] := B - C/G[j-1];$

$G1[j] := Z - Z1/G1[j-1]$

**конец;**

для  $k := 1$  шаг 1 до  $d$  цикл

**начало**

для  $j := 1$  шаг 1 до  $n-1$  цикл

**начало**

$U[j] := X[j, 1]; U1[j] := T[j, 1]; Z := 0; Z1 := 0;$

для  $i := 1$  шаг 1 до  $m$  цикл

начало

кинетика:

начало

вещественные  $K, P$ ;

если  $p \neq 0$  то {ввод ( $K, P$ );  $p := 0$ };

$W := K \times (1 - X[j, i]) \times \exp(T[j, i] / (P \times T[j, i] + 1))$ ;

конец;

$B := (2 \times i - 1) \times h \uparrow 2 / (i \times 2 \times t)$ ;  $C := (i - 1) / i$ ;

$f := B / DR \times (X[j, i] + t \times W)$ ;

$X[j, i] := (f + C \times Z) / D[i]$ ;  $Z := X[j, i]$ ;

$f := B / TR \times (T[j, i] + QP \times t \times W)$ ;

$T[j, i] := (f + C \times Z1) / D1[i]$ ;  $Z1 := T[j, i]$

конец;

$X[j, m] := X[j, m] \times D[m] / (D[m] - 1)$ ;

$T[j, m] := (h \times \text{gamma} \times T0 + T[j, m] \times (TR + h \times \text{gamma}) \times D1[m]) / ((TR + h \times \text{gamma}) \times D1[m] - TR)$ ;

для  $i := m$  шаг  $-1$  до 2 цикл

начало

$X[j, i - 1] := X[j, i] / D[i - 1] + X[j, i - 1]$ ;

$T[j, i - 1] := T[j, i] / D1[i - 1] + T[j, i - 1]$

конец

конец;

$B := (2 \times DA + l) / (2 \times DA - l)$ ;

$C := (2 \times TA + l) / (2 \times TA - l)$ ;

для  $i := 1$  шаг 1 до  $m$  цикл

начало

$Z := 0$ ;  $Z1 := 0$ ;

для  $j := 1$  шаг 1 до  $n - 1$  цикл

начало

$f := (2 \times l \uparrow 2 / ((2 \times DA - l) \times t)) \times X[j, i]$ ;

$X[j, i] := (f + B \times Z) / G[j]$ ;  $Z := X[j, i]$ ;

$f := 2 \times l \uparrow 2 / ((2 \times TA - l) \times t) \times T[j, i]$ ;

$T[j, i] := (f + C \times Z1) / G1[j]$ ;  $Z1 := T[j, i]$

конец;

$X[n - 1, i] := X[n - 1, i] \times G[n - 1] / (G[n - 1] - 1)$ ;

$T[n - 1, i] := T[n - 1, i] \times G1[n - 1] / (G1[n - 1] - 1)$ ;

для  $j := n - 1$  шаг  $-1$  до 2 цикл

начало

$X[j - 1, i] := X[j, i] / G[j - 1] + X[j - 1, i]$ ;

$T[j - 1, i] := T[j, i] / G1[j - 1] + T[j - 1, i]$

конец

конец;

$H := 0$ ;  $L := 0$ ;

для  $j := 1$  шаг 1 до  $n - 1$  цикл

начало

$H1 := \text{abs}(X[j, 1] - U[j])$ ;

если  $H1 > H$  то  $H := H1$ ;

$L1 := \text{abs}(T[j, i] - U1[j])$ ;

если  $L1 > L$  то  $L := L1$  конец;

если  $H < e\Delta < e$  то на  $S$

конец;

$S$ : вывод ( $k, l, h, DR, TR, DA, TA, t, \text{gamma}, QP, e, T0$ ,

конец

конец\*

В программе № 9 вычисляются значения  $T$ ,  $x$ ,  $T_x$ , удовлетворяющие системе уравнений

$$D_R \left( \frac{\partial^2 x}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial x}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 x}{\partial \varphi^2} \right) + w(x, T) = \frac{\partial x}{\partial \xi},$$

$$T_R \left( \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} \right) + Q_p w(x, T) = \frac{\partial T}{\partial \xi},$$

$$\frac{\partial T_x}{\partial \xi} = \gamma_1 (T - T_x)$$

с граничными условиями (рис. 3.6):

$$\text{при } \rho = r \quad \frac{\partial x}{\partial \rho} = 0, \quad T_R \frac{\partial T}{\partial \rho} = \gamma (T - T_x),$$

$$\text{при } \rho = \frac{1}{\cos \varphi}, \quad \frac{\partial x}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial n} = 0,$$

$$\text{при } \varphi = 0, \quad \varphi = \frac{\pi}{6} \quad \frac{\partial x}{\partial \varphi} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial \varphi} = 0$$

и начальными данными: при  $\xi = 0$

$$x = x_0; \quad T = T_0; \quad T_x = T_0.$$

В данной программе рассматривается процесс с внутренним теплообменом с одинарными трубками. Нагрев газа в трубках описывается последним уравнением. Знак параметра определяет противоточные («минус») или прямоточные («плюс») трубки.

Решение ищется в области, изображенной на рис. 3.6.

В программе производится ввод в следующем порядке:

$M$  — число точек по радиусу;

$n$  — число точек по  $\varphi$ ;

$d$  — число итераций, через которое происходят выдачи результатов  $x_{ji}$ ,  $T_{ji}$ ,  $T_{xj}$ ;

$r$  — радиус окружности;

$t$  — шаг по высоте  $\xi$  реактора;

$DR$ ,  $TR$  — коэффициенты системы;

$p$  — любое число, не равное 0 (вводится, чтобы машина ввела параметры кинетики для вычисления функции  $W(x, T)$ ;

$QR$  — коэффициент при  $W(x, T)$  во втором уравнении системы;

$\gamma$   
 $T_0$   
 $\gamma_1$

— обозначение коэффициентов  $\gamma$ ,  $T_0$ ,  $\gamma_1$ ;

После этого вводятся коэффициенты кинетического члена  $W(x, T)$  —  $K$ ,  $P$ .

При работе программы выдачи происходят циклически в следующем порядке:

1)  $F$  — высота реактора, на которой вычислены  $x_{ji}$ ,  $T_{ji}$ ,  $T_{xj}$ ;

2)  $x$  —  $(j, i) = (j \times l, i \times h)$  значение сеточной функции в узле (порядок выдачи  $x_{ji}$ :  $i = 1, \dots, M+1$ ,  $j = 1, \dots, n$ );

3)  $l$  и  $h$  — шаги по  $\varphi$  и радиусу;

4)  $T_{ji}$  — порядок выдачи, аналогичный  $x_{ji}$ ;

5)  $T_{xj}$  —  $(j = 1, \dots, n)$ .



В конце работы программы выдаются параметры, при которых вычислялись  $x, T, T_x$ . Порядок выдачи:  $DR, TR, \text{gamma}, \text{gamma } 1, QP, T0, d, r, t, l, h$ . Все они описаны выше.

Вид функции  $W(x, T)$  в программе можно менять, изменив блок программы с меткой: кинетика: **начало... конец**.

В программе № 9 приведена кинетическая зависимость  $W(x, T)$  для реакции первого порядка. В дополнении к программе отдельно написан блок для вычисления кинетической зависимости процесса синтеза аммиака.

### Программа № 9

**начало** целые  $i, j, m, M, n, d, k$ ;  
**вещественные**  $h, l, r, t, DR, TR, p, QP, \text{gamma } T0$ ,  
 $B, c, z, z1, W, f, u, v, \text{gamma } 1, F$ ;  
**ввод**  $(M, n, d, r, t, DR, TR, p, QP, \text{gamma } T0, \text{gamma } 1)$ ;  
**начало** массив  $X, T, [1:n, 1:M+1], D, D1[1:n, 1:M], G, G1[0:M],$   
 $N, N1, TX[1:n]$ ;  
 $F := 0$ ;  $l := 3.14159265 / (6 \times n)$ ;  $h := 2 \times (1 / \cos(n \times l - l/2) - r) / (2 \times M + 1)$ ;  
**для**  $j := 1, \dots, n$  **цикл** **начало**  $TX[j] := T0$ ;  
**для**  $i := 1, \dots, M$  **цикл** **начало**  $X[j, i] := 0$ ;  $T[j, i] := T0$  **конец**  
**конец**;  
**для**  $i := 1$  **шаг** 1 **до**  $M$  **цикл**  
**начало**  $B := ((r + i \times h) \times l) \uparrow 2/t$ ;  $z := 1$ ;  $z1 := 1$ ;  
**для**  $j := 1$  **шаг** 1 **до**  $n$  **цикл**  
**начало**  $D[j, i] := B / DR + 2 - 1/z$ ;  $z := D[j, i]$ ;  
 $D1[j, i] := B / TR + 2 - 1/z1$ ;  $z1 := D1[j, i]$ ;  
**конец** **конец**;  
 $G[0] := 1$ ;  $G1[0] := (TR + h \times \text{gamma}) / TR$ ;  
**для**  $i := 1$  **шаг** 1 **до**  $M$  **цикл**  
**начало**  $B := 2 \times (r + i \times h) / (t \times (2 \times r + 2 \times h \times i + h))$ ;  
 $c := (2 \times r + 2 \times i \times h - h) / (2 \times r + 2 \times h \times i + h)$ ;  
 $G[i] := B \times (h \uparrow 2 + 2 \times t \times DR) / DR - c / G[i - 1]$ ;  
 $G1[i] := B \times (h \uparrow 2 + 2 \times t \times TR) / TR - c / G1[i - 1]$ ;  
**конец**;  
**S:** **для**  $k := 1$  **шаг** 1 **до**  $d$  **цикл**  
**начало**  $T0 := 0$ ;  
**для**  $i := 1$  **шаг** 1 **до**  $M$  **цикл**  
**начало**  $z := 0$ ;  $z1 := 0$ ;  
**для**  $j := 1$  **шаг** 1 **до**  $n$  **цикл**  
**начало**  $B := ((r + i \times h) \times l) \uparrow 2/t$ ; **если**  $i = 1$  **то**  
**начало**  $TX[j] := TX[j] \times (1 + t \times \text{gamma } 1 \times TR / (TR + h \times \text{gamma})) -$   
 $t \times \text{gamma } 1 \times TR / (TR + h \times \text{gamma}) \times T[j, 1]$ ;  $T0 := T0 + TX[j]$   
**конец**;  
**кинетика:** **начало** **вещественные**  $K, P$ ;  
**если**  $p \neq 0$  **то** {**ввод**  $(K, P)$ ;  $p := 0$ };  
 $W := K \times (1 - X[j, i] \times \exp(T[j, i] / (P \times T[j, i] + 1)))$ ;  
**конец**;  
 $f := B / DR \times (X[j, i] + t \times W)$ ;  $X[j, i] := (f + z) / D[j, i]$ ;  $z := X[j, i]$ ;  
 $f := B / TR \times (T[j, i] + QP \times t \times W)$ ;  $T[j, i] := (f + z1) / D1[j, i]$ ;  $z1 := T[j, i]$   
**конец**;  
 $X[n, i] := X[n, i] \times D[n, i] / (D[n, i] - 1)$ ;  
 $T[n, i] := T[n, i] \times D1[n, i] / (D1[n, i] - 1)$ ;

для  $j := n$  шаг — 1 до 2 цикл  
 начало  $X[j-1, i] := X[j, i]/D[j-1, i] + X[j-1, i]$ ;  
 $T[j-1, i] := T[j, i]/D[j-1, i] + T[j-1, i]$   
 конец  
 конец;  $T0 := T0/n$ ;  
 для  $j := 1$  шаг 1 до  $n$  цикл  
 начало  $m := \text{entier}((1/\cos(j \times l - l/2) - r)/h + h/2)$ ;  
 $z := 0$ ;  $TX[j] := T0$ ;  $z1 := \text{gamma} \times h \times TX[j]/(TR +$   
 $+ h \times \text{gamma})$ ;  
 если  $j = n$  то  
 начало  $N[n] := 0$ ;  $N1[n] := 0$  конец  
 иначе начало  $N[j] := X[j+1, m] - X[j, m]$ ;  $N1[j] :=$   
 $= T[j+1, m] - T[j, m]$   
 конец;  
 для  $i := 1$  шаг 1 до  $M$  цикл  
 начало  $c := (2 \times r + 2 \times i \times h - h)/(2 \times r + 2 \times i \times h + h)$ ;  
 $B := 2 \times h \uparrow 2 \times (r + i \times h)/(t \times (2 \times r + 2 \times i \times h + h))$ ;  
 $f := B/DR \times X[j, i]$ ;  $X[j, i] := (f + c \times z)/G[i]$ ;  $z := X[j, i]$ ;  
 $f := B/TR \times T[j, i]$ ;  $T[j, i] := (f + c \times z1)/G1[i]$ ;  $z1 := T[j, i]$   
 конец;  $u := G[M]$ ;  $v := G1[M]$ ;  $z := 0$ ;  $z1 := 0$ ;  
 для  $i := M$  шаг — 1 до  $m+1$  цикл  
 начало  $z := z + X[j, i] \times u$ ;  $u := u \times G[i-1]$ ;  
 $z1 := z1 + T[j, i] \times v$ ;  $v := v \times G1[i-1]$   
 конец;  $X[j, M+1] := (\sin(j \times l - l/2) \times N[j] \times h/l + X[j, m]) \times u /$   
 $(G[m] - 1) - z$ ;  
 $T[j, M+1] := (\sin(j \times l - l/2) \times N1[j] \times h/l + T[j, m]) \times$   
 $\times v / (G1[m] - 1) - z1$ ;  
 для  $i := M+1$  шаг — 1 до 2 цикл  
 начало  $X[j, i-1] := X[j, i]/G[i-1] + X[j, i-1]$ ;  
 $T[j, i-1] := T[j, i]/G1[i-1] + T[j, i-1]$   
 конец  
 конец конец;  
 $F := F + d \times i$ ; вывод ( $F, X, T, TX$ );  
 если  $F < 1$  то на  $S$ ;  
 вывод ( $DR, TR, \text{gamma}, \text{gamma } 1, QP, T0, d, r, t, l, h$ )  
 конец  
 конец

#### Дополнение к программе № 9 (кинетика синтеза аммиака)

кинетика: начало  
 вещественные  $A, ze, q, b, K1, E, R, K2, Q, P, y, zh, tk$ ;  
 если  $p = 0$  то начало ввод ( $K1, E, R, K2, Q, P, y, zh, tk$ );  
 $p := 1$  конец;  
 $b := (1+y)/(1-y)$ ;  $q := (X[j, i] + zh)/(1 - X[j, i])$ ;  $A := T[j, i]$ ;  
 $ze := b \times q$ ;  $W := tk \times K1 / ((1+y) \times \text{sqr}t(P \times (1-y))) \times \exp(-E/(R \times A)) \times$   
 $\times (K2 \times \exp(Q/(R \times A)) - ze \uparrow 2 / (1 - ze) \uparrow 4) \times ((1 - ze) \uparrow 2.5 / ze)$   
 конец;

### § 10. ОБЩИЙ СЛУЧАЙ С ПЕРЕМЕННЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ

В программе № 10 вычисляются значения  $C$  и  $T$ , удовлетворяющие системе уравнений

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho D \frac{\partial C}{\partial \rho} \right) + \frac{r_0^2}{L_0^2} \frac{\partial}{\partial z} \left( D \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{r_0^2}{L_0} \frac{\partial}{\partial z} (VC) -$$

$$\begin{aligned}
 -r_0^2 W(C, T) &= r_0^2 \frac{\partial C}{\partial t}, \\
 \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho G \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) + \frac{r_0^2}{L_0^2} \frac{\partial}{\partial z} \left( G \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \frac{r_0^2}{L_0} \frac{\partial}{\partial z} (V c_p T) + \\
 + r_0^2 Q_0 W_0(C, T) &= r_0^2 c_k \frac{\partial T}{\partial t}
 \end{aligned}$$

в области

$$0 \leq \rho \leq 1; 0 \leq z \leq 1$$

с граничными условиями:

$$\text{при } \rho = 0 \quad \frac{\partial C}{\partial \rho} = \frac{\partial T}{\partial \rho} = 0,$$

$$\text{при } \rho = 1 \quad \frac{\partial C}{\partial \rho} = 0; \quad G \frac{\partial T}{\partial \rho} = r_0 \gamma (T_x - T),$$

$$\text{при } z = 0 \quad D \frac{\partial C}{\partial z} = L_0 (Vc - Vc_0); \quad G \frac{\partial T}{\partial z} = L_0 (Vc_p T - Vc_p T_0),$$

$$\text{при } z = 1 \quad \frac{\partial C}{\partial z} = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial z} = 0$$

и начальными данными: при  $t=0$   
 $T=T_0, \quad C=C_0.$

Вводимые параметры:

$m$  — число точек по  $\rho$ ;

$n$  — число точек по  $z$  ( $n$  должно быть всегда больше  $m+1$ );

$d$  — число итераций, через которые происходят выдачи;

$t$  — шаг по времени;

$T_0$  —  $T_0$ , указанное в начальных данных;

$a$  — коэффициент для определения  $C_0$ ;

$be$  — коэффициенты для определения  $ga$  функций  $W, V, c_0, c_p, G$ ;

$VO, z$  — коэффициенты для определения  $V$ ;

$S$  — площадь поперечного сечения реактора;

$T_n$  — начальная температура для определения  $V$ ;

$l_1, g, g_1, b, p$  — коэффициенты для определения  $W$  (см. дальше);

$r_0$  — радиус реактора;

$c_k$  — коэффициент правой части во втором уравнении системы;

$L$  — длина реактора;

$D, D_1$  — коэффициенты для вычисления диффузии по радиусу и длине реактора;

$Q$  — коэффициент при  $W$  во втором уравнении системы;

$T_x$  — температура холодильника;

$e$  — точность итераций; программа производит выдачи циклически через указанное число итераций ( $d$ );

$k$  — фактическое число итераций (если нужная точность установилась, программа прекращает работу, хотя и  $k$  может быть меньше  $d$ );

Коэффициент  $K_0$  учитывает линейное изменение активности катализатора в начале слоя на длине  $l_1$ :

$$K_0 = \begin{cases} \frac{1-b}{l_1} l + b, & \text{если } z < l_1, \\ 1, & \text{если } z \geq l_1, \end{cases}$$

$$C_0 = \frac{a}{1 + \beta + \gamma}.$$

В программе  $\beta$  и  $\gamma$  обозначены  $be$  и  $ga$ .

$$V = \frac{V_0 z \left( \beta + \gamma + \frac{C}{C_0} \right) (T + 273)}{ST_n},$$

$$c_p = \frac{0,289 + 0,311\beta + 0,306\gamma + 0,18 \frac{C}{C_0}}{\beta + \gamma + \frac{C}{C_0}}.$$

Коэффициенты диффузии по радиусу  $D_p = DV$  и по длине реактора  $D_1 = D_1 V$ . Вид функции  $G$  приведен в программе.

$$E - \max |C_{ji}^{k+1} - C_{ji}^k|;$$

$$M - \max |T_{ji}^{k+1} - T_{ji}^k|;$$

$e$  — описан выше.

$C_{ji}$  — значение сеточной функции в узле  $(ji) = [j \times i, (i - 1/2)h]$ ;  $(l, h)$  — шаги по радиусу и высоте реактора).

Порядок выдачи  $C_{ji}$  следующий:  $i=0, 1, \dots, m+1$ ;  $j=0, 1, \dots, n$ .

Аналогично осуществляется выдача  $T_{ji}$ ,  $V_{ji}$ ,  $cp_{ji}$ ,  $G_{ji}$ , гамма  $j$ ,  $G_i$  (гамма  $j$  и  $G_i$  — коэффициенты из граничного условия при  $\rho=1$ ,  $j=0, 1, \dots, n$ ).

Переменные коэффициенты в системе уравнений слишком громоздки и вычисляются в радиальном и продольном направлении по-разному.

В качестве примера приведена функция  $W(C, T)$  для процесса паразитного гидрохлорирования ацетилена

$$W(C, T) = \frac{\rho^2 K_1 K_0 \left( \beta - 1 + \frac{C}{C_0} \right) \frac{C}{C_0}}{\left( \beta + \gamma + \frac{C}{C_0} \right) \left[ (K_2 + \rho) \left( \beta - 1 + \frac{C}{C_0} \right) + K_2 (1 + \rho) \right]},$$

где

$$K_1 = g \exp \left( \frac{-3070}{T + 273} \right),$$

$$K_2 = g \exp \left( \frac{-3870}{T + 273} \right).$$

### Программа № 10

начало целые  $i, j, d, n, m, k$ ;

вещественные  $E, t, T0, a, M, be, ga, N, co, f, TX, F, Q, V0, z, s, Tn, H, X, B, A, B1, l, h, h0, R, W, ll, g, gl, b, K0, K, K1, v, p, r, ck, L, D, D1$ ;

ввод  $(m, n, d, t, T0, a, be, ga, V0, z, s, Tn, ll, g, gl, b, p, r, ck, L, D, D1, Q, TX, e)$ ;

начало массив  $C, T, V, Cp, G$   $[0:n, 0:m+1]$ , гамма,  $U, U1, u, u1$   $[0:n]$ ;

$l := 1/n$ ;  $h := 2/(2 \times m + 1)$ ;  $c0 := a/(1 + be + ga)$ ;

для  $j := 0, \dots, n$  цикл для  $i := 0, \dots, m+1$  цикл

начало  $C[j, i] := c0$ ;  $T[j, i] := T0$  конец;

S: для  $k := 1$  шаг 1 до  $d$  цикл

начало для  $j := 0$  шаг 1 до  $n$  цикл  
 начало для  $i := 0$  шаг 1 до  $m+1$  цикл  
 начало  $H := T[j, i] + 273$ ;  $X := C[j, i]$ ;  
 $V[j, i] := V0 \times z \times (be + ga + X/c0) \times H / (s \times Tn)$ ;  
 $A := (0.289 + 0.311 \times be + 0.306 \times ga + 0.180 \times X/c0) / (be + ga + X/c0)$ ;  
 $Cp[j, i] := A$ ;  $B := (X/c0) \times (198.2 + H) / 448 + (be - 1 + X/c0) \times (360 + H) / 625 + (1 - X/c0) \times (383 + H) / 282 + ga \times (86 + H) / 4070$ ;  
 $N := (be + ga + X/c0) \times sgrt((H/313) \uparrow 3) / (B \times 10 \uparrow 5)$ ;  
 $B1 := 2.19744_{10} - 4 \times (0.289 + 0.131 \times be + 0.126 \times ga) \times z / (1 + be + ga)$ ;  
 $G[j, i] := 4.29024 \times N \times A + 2.1556_{10} - 13 \times H \uparrow 3 + 0.0837 \times B1 \times A / (A - 0.18)$   
 конец;

$h0 := 1 / (4.25_{10} - 3 \times (1 / (4.29024 \times A \times N + 3.7723_{10} - 13 \times H \uparrow 3) - 0.5 / (4.29024 \times A \times N + 2.1556_{10} - 13 \times H \uparrow 3)))$ ;  
 $R := 1.68_{10} - 4 \times (be + ga + X/c0) \times z / ((1 + be + ga) \times N)$ ;  $h0 := h0 + (1123.572 \times A \times N \times R / (sgrt(R) + 6940.72))$ ;  
 $gamma[j] := h0 / (1 + 7.1 \times h0)$   
 конец;

для  $j := 0$  шаг 1 до  $n$  цикл  
 начало  $u[j] := C[j, 1]$ ;  $u1[j] := T[j, 1]$ ;  $C[j, 0] := 0$ ;  $T[j, 0] := 0$ ;  
 $U[0] := 1$ ;  $U1[0] := 1$ ; для  $i := 1$  шаг 1 до  $m$  цикл  
 начало  $X := C[j, i]$ ;  $H := 273 + T[j, i]$ ;  $K := g \times \exp(-3070/H)$ ;  
 $K1 := g1 \times \exp(-3870/H)$ ;  $K0 := ((1 - b) / l1) \times j \times l + b$ ;  
 если  $K0 \geq 1$  то  $K0 := 1$ ;  $W := p \uparrow 2 \times K \times K0 \times (be - 1 + X/c0) \times (X/c0) / ((be + ga + X/c0) \times ((K1 + p) \times (be - 1 + X/c0) + K1 \times (1 + ga)))$ ;  
 $A := (1 - 1/i) \times (V[j, i] + V[j, i - 1]) / (V[j, i + 1] + V[j, i])$ ;  
 $F := (2 - 1/i) \times h \uparrow 2 \times r \uparrow 2 / (t \times D \times (V[j, i + 1] + V[j, i]))$ ;  $B := 1 + F + A$ ;  
 $f := F \times (X - t \times W)$ ;  $U[i] := 1 / (B - A \times U[i - 1])$ ;  
 $C[j, i] := (C[j, i - 1] \times A + f) \times U[i]$ ;  
 $A := (1 - 1/i) \times (G[j, i] + G[j, i - 1]) / (G[j, i + 1] + G[j, i])$ ;  
 $F := (2 - 1/i) \times h \uparrow 2 \times r \uparrow 2 \times ck / (t \times (G[j, i + 1] + G[j, i]))$ ;  $B := 1 + F + A$ ;  
 $f := F \times (T[j, i] + t \times Q \times W / ck)$ ;  $U1[i] := 1 / (B - A \times U1[i - 1])$ ;  
 $T[j, i] := (T[j, i - 1] \times A + f) \times U1[i]$ ;  
 конец;  $v := (G[j, m + 1] + G[j, m]) / 2$ ;  $C[j, m] := C[j, m] / (1 - U[m])$ ;  
 $T[j, m] := (T[j, m] \times (v + r \times h \times gamma[j] + r \times h \times gamma[j] \times TX \times U1[m]) / ((v + r \times h \times gamma[j] - (v \times U1[m])))$ ;  
 $C[j, m + 1] := C[j, m]$ ;  $T[j, m + 1] := (v \times T[j, m] + r \times h \times gamma[j] \times TX) / (v + r \times h \times gamma[j])$ ;  
 для  $i := m$  шаг -1 до 1 цикл

начало  $C[j, i - 1] := C[j, i] \times U[i - 1] + C[j, i - 1]$ ;  $T[j, i - 1] := T[j, i] \times U1[i - 1] + T[j, i - 1]$ ;  $G[j, i] := G[j, i] + B1 \times 0.4873 / (1 - 0.18 / Cp[j, i])$ ;  
 конец; для  $i := 0, m + 1$  цикл  $G[j, i] := G[j, i] + B1 \times 0.4873 / (1 - 0.18 / Cp[j, i])$ ;  
 конец;  $E := 0$ ;  $M := 0$ ; для  $i := 0$  шаг 1 до  $m + 1$  цикл  
 начало  $U[0] := D1 / (D1 + L \times l)$ ;  $U1[0] := (G[0, i] + G[1, i]) / (G[0, i] + G[1, i] + L \times l \times (V[0, i] + V[1, i]) \times (Cp[0, 1] + Cp[1, i]) / 2)$ ;  
 $C[0, i] := c0 \times L \times l / (D1 + L \times l)$ ;  
 $T[0, i] := T0 \times L \times l \times (V[0, i] + V[1, i]) \times (Cp[0, i] + Cp[1, i]) \times U1[0] / (2 \times (G[0, i] + G[1, i]))$ ; для  $j := 1$  шаг 1 до  $n - 1$  цикл  
 начало  $F := 2 \times L \uparrow 2 \times l \uparrow 2 / (t \times D1 \times (V[j + 1, i] + V[j, i]))$ ;  
 $A := (V[j, i] + V[j - 1, i]) / (V[j + 1, i] + V[j, i] + 2 \times L \times l \times V[j - 1, i] / (D1 \times (V[j + 1, i] + V[j, i])))$ ;  
 $B := 1 + F + (V[j, i] + V[j - 1, i]) / (V[j + 1, i] + V[j, i] + 2 \times L \times l \times V[j, i] / (D1 \times (V[j + 1, i] + V[j, i])))$ ;  
 $f := F \times C[j, i]$ ;  $U[j] := 1 / (B - A \times U[j - 1])$ ;  $C[j, i] := (C[j - 1, i]$

$\times A + f) \times U[j]$ ;  
 $F := ck \times 2 \times L \uparrow 2 \times l \uparrow 2 / (t \times (G[j+1, i] + G[j, i]));$   
 $A := (G[j, i] + G[j-1, i]) / (G[j+1, i] + G[j, i]) + 2 \times L \times l \times V[j-1, i] \times$   
 $\times Cp[j-1, i] / (G[j+1, i] + G[j, i]); B := 1 + F + (G[j, i] + G[j-1, i])$   
 $/ (G[j+1, i] + G[j, i]) + 2 \times L \times l \times V[j, i] \times Cp[j, i] / (G[j+1, i] + G[j, i]);$   
 $f := F \times T[j, i];$   
 $U1[j] := 1 / (B - A \times U1[j-1]); T[j, i] := (T[j-1, i] \times A + f) \times U1[j];$   
**конец;**  $C[n-1, i] := C[n-1, i] / (1 - U[n-1]); C[n, i] := C[n-1, i];$   
 $T[n-1, i] := T[n-1, i] / (1 - U1[n-1]); T[n, i] := T[n-1, i];$   
 для  $j := n-1$  шаг  $-1$  до  $1$  цикл  
**начало**  $C[j-1, i] := C[j, i] \times U[j-1] + C[j-1, i]; T[j-1, i] :=$   
 $= T[j, i] \times U1[j-1] + T[j-1, i];$   
 если  $i=1$  то **начало**  $R := \text{abs}(C[j, 1] - u[j]);$   
 если  $R > E$  то  $E := R; R := \text{abs}(T[j, 1] - u1[j]);$   
 если  $R > M$  то  $M := R$  **конец**  
**конец**  
**конец;** если  $E < e \wedge M < e$  то на  $J$  **конец**;  
 $J$ : вывод  $(k, E, M, e, C, T, V, Cp, G, \text{gamma});$   
 для  $j := 0$  шаг  $1$  до  $n$  цикл  
**начало**  
 для  $i := 0$  шаг  $1$  до  $m+1$  цикл  
**начало**  $G[j, i] := G[j, i] - 0.4873 B1 / (1 - 0.18 / Cp[j, i])$   
**конец**  
**конец;** вывод  $(G)$ ; если  $E > \epsilon VM > \epsilon$  то на  $S$   
**конец**  
**конец\***

---

*Михаил Гаврилович Слинько, Владимир Сергеевич Бесков, Владимир Борисович Скоморохов, Валерий Александрович Кузин, Виктор Михайлович Цыганов, Анатолий Владимирович Засмолин*

**МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ  
НА АНАЛОГОВЫХ И ЦИФРОВЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МАШИНАХ**

**Ответственный редактор А. Ермакова**

Редактор **И. П. Зайцева**  
Художественный редактор **В. И. Шумаков**  
Художник **И. Ф. Вяткин**  
Технический редактор **Т. К. Овчинникова**  
Корректоры **Н. Н. Тясто, Т. Н. Моисеенко**

---

Сдано в набор 15 июля 1971 г. Подписано в печать 5 апреля 1972 г. МН 01650. Формат бумаги 70×108<sup>1/16</sup>. 9,5 печ. л., 13,3 усл. печ. л., 9,4 уч.-изд. л. Заказ № 72. Тираж 2850 экз. Цена 94 коп.

---

Издательство «Наука», Сибирское отделение. Новосибирск, 99, Советская, 18.  
4-я типография издательства «Наука», Новосибирск, 77, Станиславского, 25.

# ЗАМЕЧЕННЫЕ ОПЕЧАТКИ

Стр.	Строка	Напечатано	Следует читать
48	19 сверху	$C = 6,5\%$	$C_0 = 6,5\%$
96	9 снизу	(3.63)	(3.69)
142	5 снизу	$x - (j,i)$	$x_{ji} - (j,i)$

М. Г. Слинько и др. «Методы моделирования каталитических процессов аналоговых и цифровых вычислительных машинах».